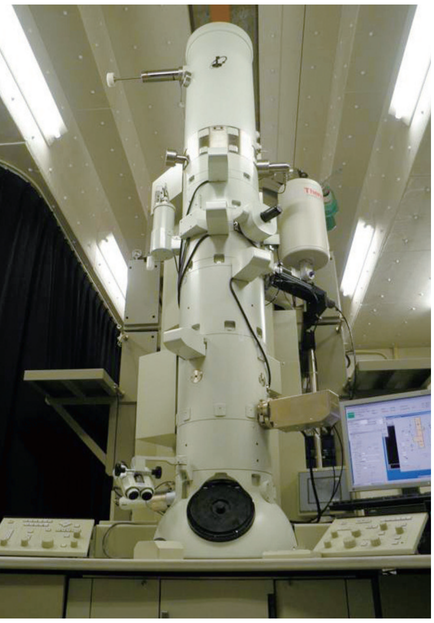
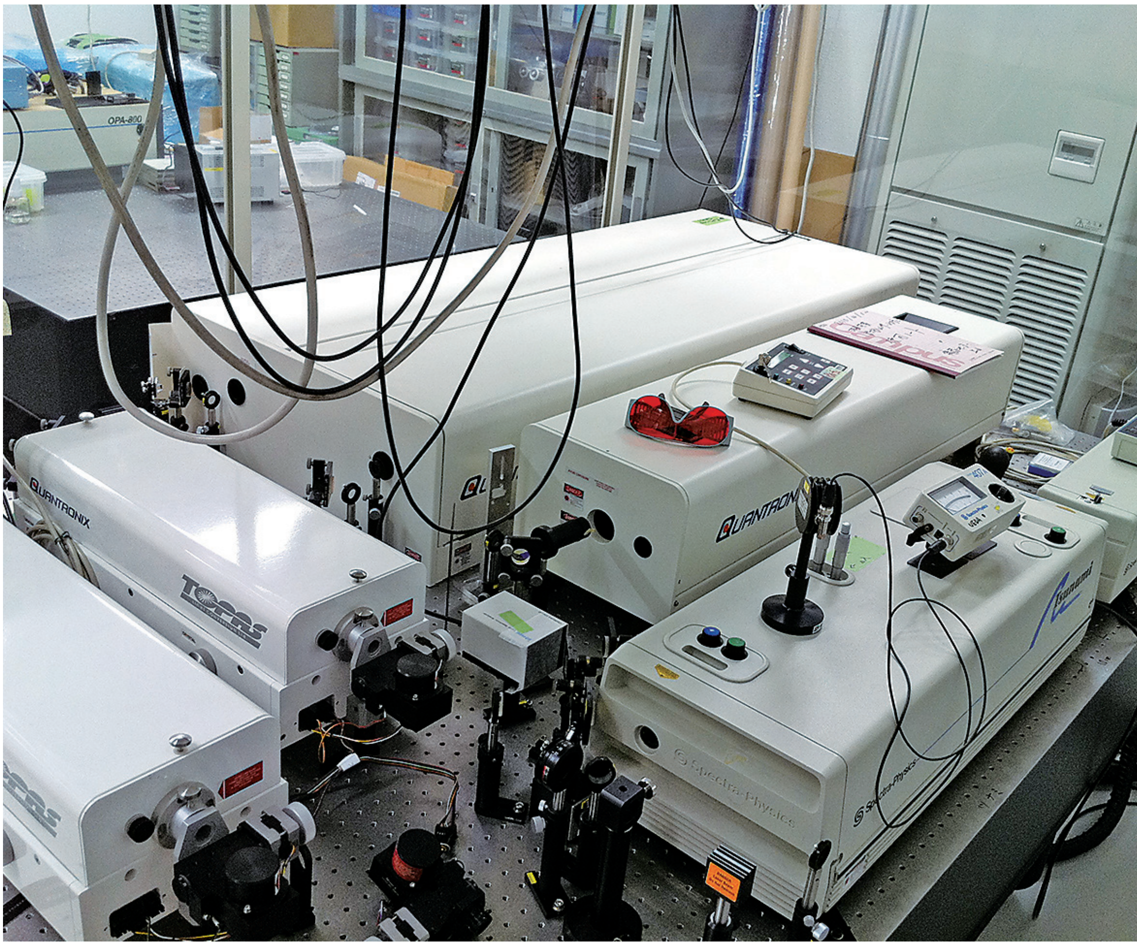
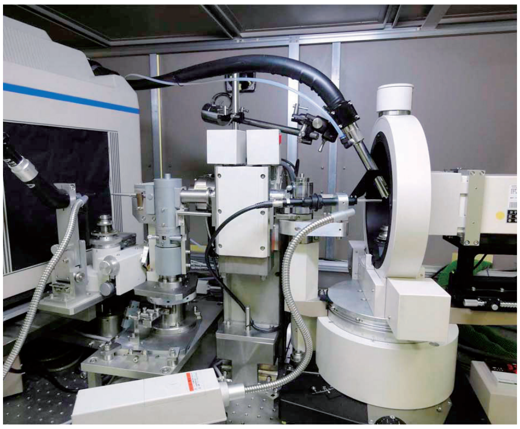
ISSN　1884−1627

機器センターたより No.6

自然科学研究機構
分子科学研究所　機器センター

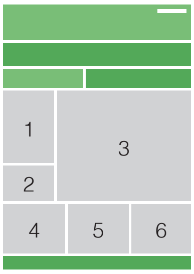






機器センターたより No.6

自然科学研究機構
分子科学研究所　機器センター



【表紙の写真】
1：電子顕微鏡
2：ヘリウム液化機
3：ピコ秒レーザー
4：SQUID型磁化測定装置
5：単結晶X線回折装置
6：準備室真空ライン
（本文　所有設備紹介　P25～参照）

機器センターたより　No. 6

分子科学研究所　機器センター

■目　次

１．巻頭言 …… 1
２．構成員 …… 2
３．所有設備一覧 …… 3
４．施設マップ …… 5
５．センターの利用方法
施設利用方法 …… 7
ナノテクノロジープラットフォーム事業について …… 13
大学連携研究設備ネットワーク利用方法 …… 14
液体ヘリウム利用方法 …… 17
液体窒素利用方法 …… 19
小型貸出機器利用方法 …… 21
サンプル準備室利用方法 …… 23
施設利用者控室 …… 24
６．所有設備紹介
電子スピン共鳴(ESR)装置 …… 25
SQUID 型磁化測定装置 …… 27
単結晶 X 線回折装置 …… 29
粉末 X 線回折装置 …… 31
X 線光電子分光(XPS)装置 …… 32
電子顕微鏡 …… 34
熱分析装置 …… 36
マトリックス支援レーザー脱離イオン化-飛行時間型質量分析計(MALDI-TOF-MS) …… 38
有機微量元素分析装置 …… 39
蛍光 X 線分析装置 …… 40
核磁気共鳴(NMR)装置 …… 41
ピコ秒レーザー …… 45
ナノ秒レーザー …… 47
蛍光分光光度計 …… 49
円二色性分散計 …… 51
可視紫外分光光度計 …… 52
フーリエ変換赤外(FTIR)分光光度計 …… 53

顕微ラマン分光装置 …… 54

超伝導磁石付希釈冷凍機 …… 55

低温冷媒の供給設備 …… 56

７．交流

所外利用者アンケート報告 …… 58

所内利用者アンケート報告 …… 63

機器センター長からのコメント …… 66

８．センターアクティビティ

国際研究協力事業報告「ESR 国際連携検討会」 …… 67

分子科学研究所　物質分子科学研究領域　　准教授　中村　敏和

９．研究紹介

「二次元高分子の合成及び構造特徴の解明」 …… 69

分子科学研究所　物質分子科学研究領域　　准教授　江　東林

10. 共同利用採択課題一覧

平成 24 年度分 …… 72

平成 25 年度分 …… 77

11. 設備利用状況

平成 24 年度分 …… 79

平成 25 年度分 …… 81

12. 平成 25 年度施設利用実施報告書 …… 83

13. 研究報告一覧

平成 24 年度分 …… 102

平成 25 年度分 …… 114

14. 編集委員 …… 127

巻頭言

機器センター長　大島　康裕

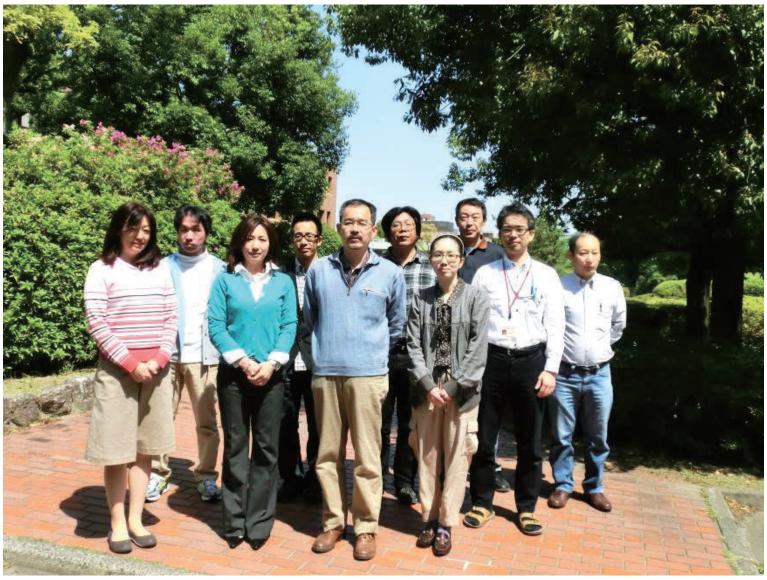
例年よりも半年ほど遅くなりましたが､「機器センターたより」第６号をお届けします。刊行がこの時期にずれ込みましたのは、本号より各年度における施設利用報告書をまとめて掲載するよう改定したためです。当センターの各施設を利用した研究者の方々には、これまでも報告書をご提出頂いていましたが、オープンにアクセスできる体制ではありませんでした。昨年(2013年)度から研究成果や進捗状況を1ページにまとめて年度末までにご報告頂くこととし､「センターたより」にまとめて掲載することにより、当センターの利用状況とそこからのアウトプットを俯瞰できるようにしました。分子研内の他の施設では既にかなり昔から実施されてきたことではありますが、ようやく当機器センターも体系的データの集積をもとに活動状況を評価する枠組みを整えつつあります。大学研究者へ広く開かれた組織として、今後の方向性を決める上でも極めて重要な取り組みですので、施設利用者の方々にはペーパーワーク増をお願いすることとなり恐縮ですが、ご理解とご協力を頂ければ幸いです。

前号の巻頭言でもご紹介しましたが、当機器センターでは、文科省より委託を受けた「ナノテクノロジープラットフォーム事業」と緊密に連携を取り、様々な汎用設備の維持・管理と所外研究者への供用サポートを行っています。2013年度当初の分子スケールナノサイエンスセンター改組を受けて､「ナノプラットフォーム」事業の実務を担当する「ナノプラットフォーム室」は所長直下の機関となりましたが、引き続き当センターとの連携･情報共有を維持しています。機器センター所有の施設の中でも、電子スピン共鳴(ESR)装置（Bruker EMX Plus, E500）ならびにSQUID 型磁化測定装置は2013年度から「ナノプラットフォーム」事業にて運用する体制となりました。また、理化学研究所より２台のNMR装置(Bruker AVANCE800, AVANCE600)が移管され、昨年秋より本格的な供用が開始されています。既存の JEOL JNM-ECA920 と併せて、高磁場 NMR 装置群は極めて充実したラインナップとなり、分子研の特徴でもある手厚い人的サポートと相まって､先端的な共同研究･設備供用の実施が可能となっています。同様に、電子スピン共鳴装置に関しても各コンポーネントのアップグレードや様々なオプションの導入によって、分子研ならではの研究環境が整っています。これまでは関わりの薄かった分野の方々にも積極的に参入頂いて、新しい研究領域が切り拓ければと願っています。

機器センター主体の取組ではありませんが、分子研における共同研究・設備供用の新たな展開を目指して、国際研究協力事業として「ESR国際連携検討会｣が昨年10月末に開催されました。ESR を利用した国内外の先端計測の動向が紹介され、国際連携へのロードマップが提案されるなど、当センターの今後を検討する上でも大変に有益な情報を提供して頂きました。詳細は、本「たより」の「センターアクティビティ」欄をご覧下さい。今後は、機器センターが主体となって、分子研研究会などの枠組みも利用しながら、潜在的ユーザーを含めた情報・意見交換の場を早急に構築したいと考えています。このような取り組みは、当センター所有の設備群を活用した新分野開拓へと繋がるものと期待しています。皆様方からの忌憚のないご意見をお待ちしています。

構成員

機器センター長（併任）				
	大島康裕	光分子科学研究領域　教授	明大寺	研究棟　107
技術職員				
班長	高山敬史	寒剤（明大寺地区）	明大寺	極低温棟 103
主任	水川哲徳	寒剤（山手地区）	山　手	4 号館　204
主任	岡野芳則	微小結晶用 X 線回折装置、 大学連携研究設備ネットワーク	明大寺	南実験棟 111
主任	上田　正	レーザー、TEM、分光光度計等	明大寺	南実験棟 111
主任	牧田誠二	元素分析、質量分析等	山　手	4 号館　401
	藤原基靖	ESR、SQUID、X 線回折装置等	明大寺	極低温棟 102
	中野路子	NMR、熱分析装置等	山　手	4 号館　401
事務支援員				
	中川信代	施設利用対応等	明大寺	南実験棟 111
	太田明代	大学連携研究設備ネットワーク	明大寺	南実験棟 111



所有設備一覧

▼ 所内専用設備
ナノ ナノテクノロジープラットフォーム事業対応設備（13 ページ参照）

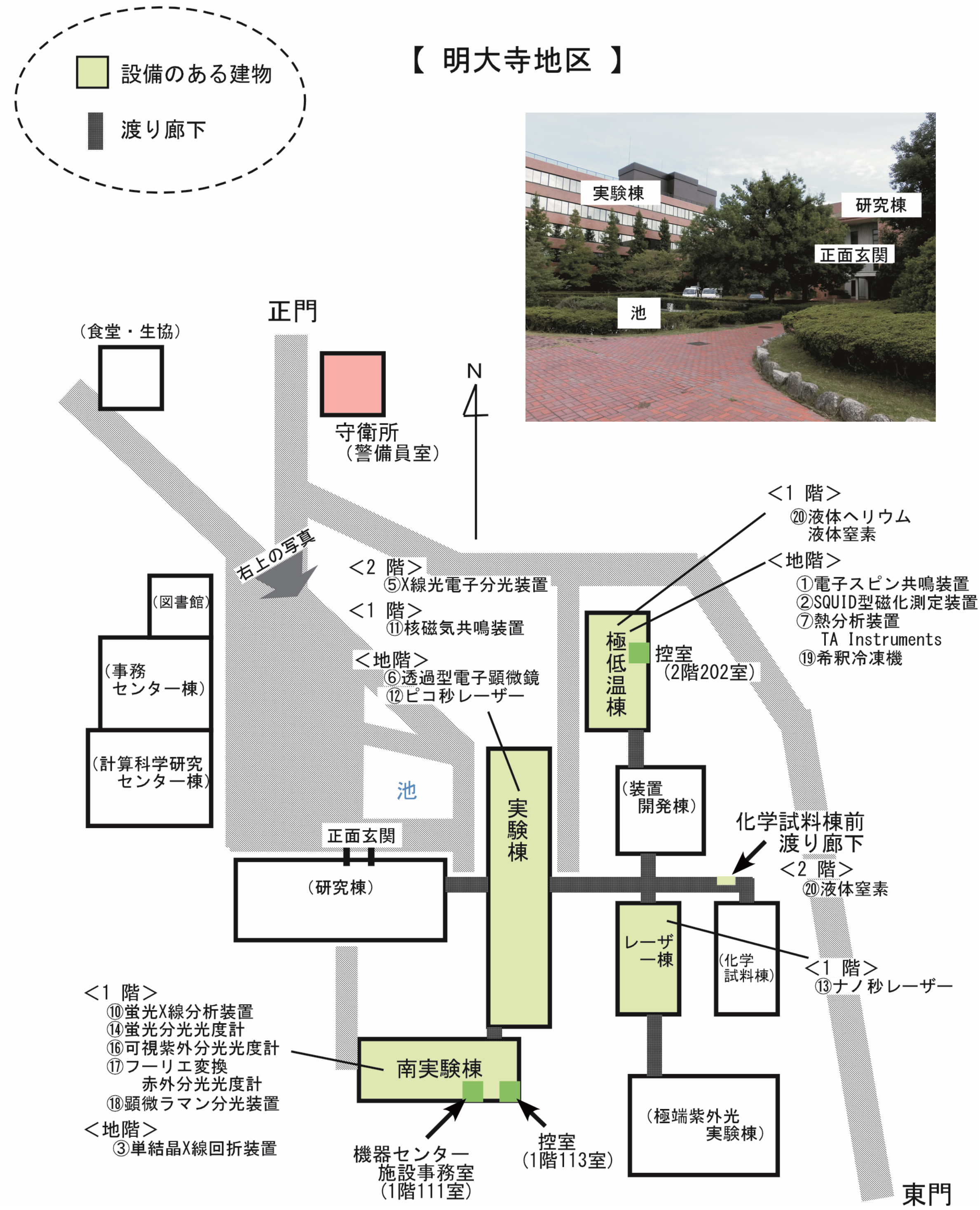
分類名／型式	設置場所	担当者
① 電子スピン共鳴（ESR）装置		
ナノ Bruker EMX Plus	極低温棟 002	藤原
ナノ Bruker E500	極低温棟 001	藤原
ナノ Bruker E680	極低温棟 001	藤原
② SQUID 型磁化測定装置		
ナノ Quantum Design MPMS-7	極低温棟 006	藤原
ナノ Quantum Design MPMS-XL7	極低温棟 006	藤原
③ 単結晶 X 線回折装置		
Rigaku MERCURY CCD-1･R-AXIS Ⅳ	南実験棟 B04	藤原
Rigaku MERCURY CCD-2	南実験棟 B04	藤原
微小結晶 /Rigaku MERCURY CCD-3	南実験棟 B04	岡野
④ 粉末 X 線回折装置		
Rigaku RINT-UltimaII	山手3号館1階X線回折測定室	藤原
⑤ X 線光電子分光（XPS）装置		
ナノ Omicron EA-125	実験棟 215	酒井
⑥ 電子顕微鏡		
ナノ 高分解能透過型電子顕微鏡（TEM）/JEOL JEM-3100FEF	実験棟 B10	上田
ナノ 走査電子顕微鏡（SEM）/JEOL JSM-6700F（1），JED-2201F	山手 4 号館 103	中尾
ナノ 集束イオンビーム加工装置（FIB）/JEOL JEM-9310FIB（P）	山手 4 号館 103	中尾
⑦ 熱分析装置		
MicroCal VP-DSC	山手 4 号館 101	中野
MicroCal iTC200	山手 4 号館 101	中野
TA Instruments TGA2950/SDT2960/DSC2920	極低温棟 010	藤原
⑧ マトリックス支援レーザー脱離イオン化-飛行時間型質量分析計（MALDI-TOF-MS）		
Applied Biosystems Voyager DE-STR	山手 4 号館 403	牧田
⑨ 有機微量元素分析装置		
▼ J-SCIENCE LAB MICRO CORDER JM10	山手 4 号館 404	牧田
⑩ 蛍光 X 線分析装置		
▼ JEOL JSX-3400RII	南実験棟 101	上田
⑪ 核磁気共鳴（NMR）装置		
ナノ JEOL JNM-ECA920	山手 5 号館	中野
ナノ Bruker AVANCE800	山手 4 号館 102	山口
ナノ Bruker AVANCE600	実験棟 119	西村
JEOL JNM-ECA600	山手 5 号館予備測定室	中野

	装置	設置場所	担当
	JEOL JNM-LA500	山手 ４号館 408	中野
▼	JEOL JNM-ECS400	山手 ４号館 408	中野
⑫	**ピコ秒レーザー**		
	Spectra-Physics, Quantronix Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS	実験棟 B08	上田
⑬	**ナノ秒レーザー**		
	エキシマー励起色素レーザー/Coherent, Lambda Physik　Compex Pro 110, LPD3002	レーザー棟 103	山中
	Nd:YAG励起 OPOレーザー/Spectra-Physics, Lambda Physik　GCR-250, Scanmate OPPO	レーザー棟 102	山中
	フッ素系エキシマーレーザー /Lambda Physik Compex 110F	レーザー棟 105	山中
⑭	**蛍光分光光度計**		
	HORIBA SPEX Fluorolog 3-21	南実験棟 101	上田
⑮	**円二色性分散計**		
	JASCO J-720WI	山手 ４号館 101	牧田
⑯	**可視紫外分光光度計**		
	Hitachi U-3500	南実験棟 101	上田
⑰	**フーリエ変換赤外（FTIR）分光光度計**		
ナノ	Bruker IFS 66v/S	南実験棟 101	賣市
⑱	**顕微ラマン分光装置**		
ナノ	RENISHAW inVia Reflex	南実験棟 101	賣市
⑲	**超伝導磁石付希釈冷凍機**		
▼	Oxford Kelvinox 400	極低温棟 004	藤原
⑳	**低温冷媒の供給設備**		
▼	明大寺地区極低温施設		
	ヘリウム液化システム	極低温棟 104	高山
	液体ヘリウム自動供給装置	極低温棟 105	高山
	液体ヘリウム貯槽	極低温棟 105	高山
	液体窒素自動供給装置	化学試料棟前渡り廊下	高山
	ヘリウム回収ライン	各実験室	高山
▼	山手地区極低温施設		
	全自動ヘリウム液化機	山手４号館	水川
	液体ヘリウム貯槽	山手４号館	水川
	液体窒素貯槽	山手４号館	水川
	液体窒素自動供給装置	山手４号館 209	水川
	ヘリウム回収ライン	各実験室	水川

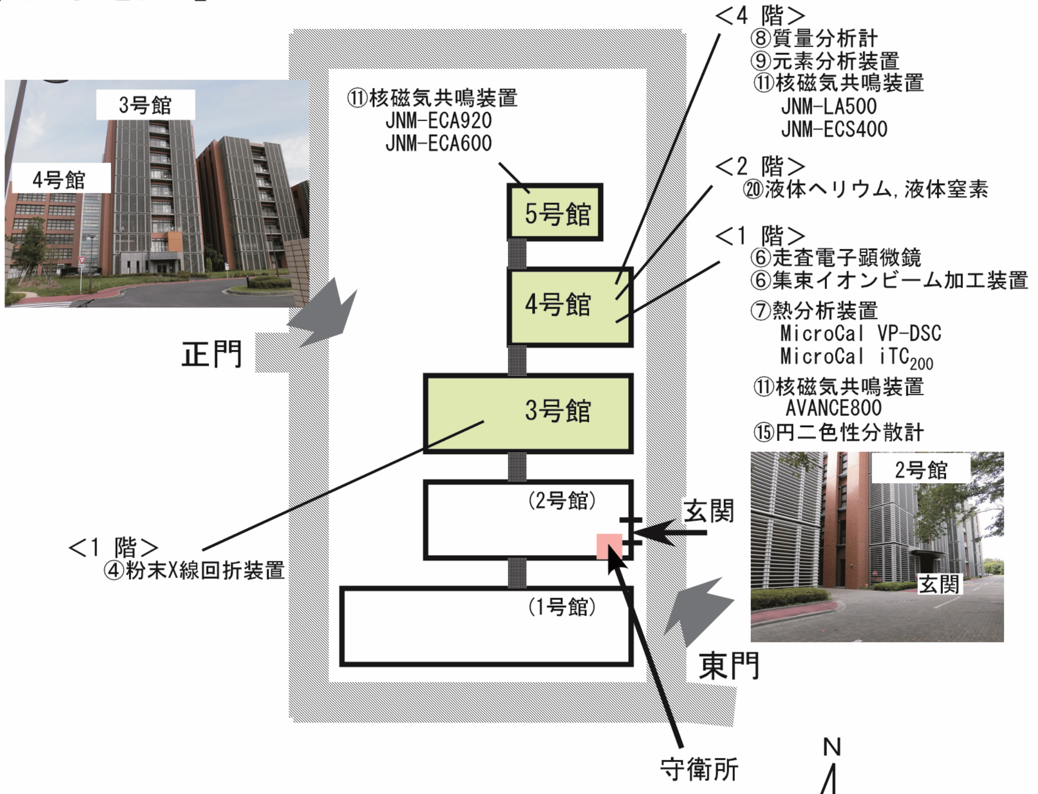
※設備のある場所については、次ページの施設マップをご参照ください。①～⑳が対応しています。

※最新情報は、機器センターホームページをご覧ください。

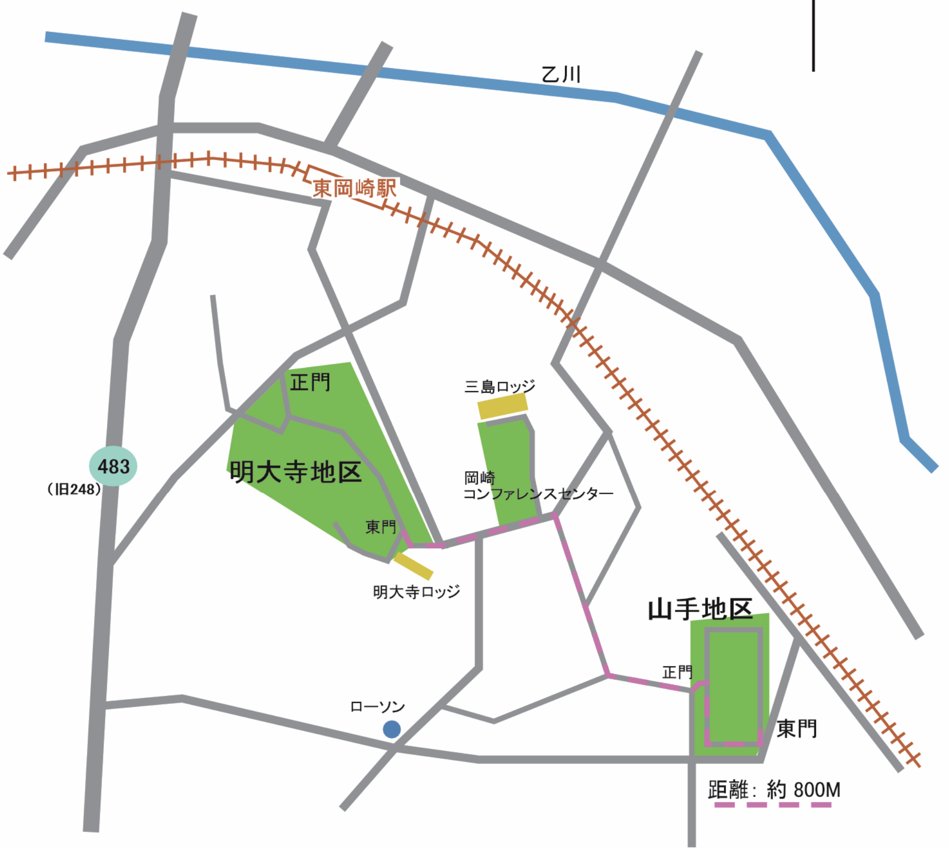
4．施設マップ


設備のある建物
渡り廊下
【 明大寺地区 】
正門
（食堂・生協）
守衛所
（警備員室）
N
右上の写真
（図書館）
（事務
センター棟）
（計算科学研究
センター棟）
池
正面玄関
（研究棟）
<2 階>
⑤X線光電子分光装置
<1 階>
⑪核磁気共鳴装置
<地階>
⑥透過型電子顕微鏡
⑫ピコ秒レーザー
実験棟
極低温棟
控室
（2階202室）
<1 階>
⑳液体ヘリウム
液体窒素
<地階>
①電子スピン共鳴装置
②SQUID型磁化測定装置
⑦熱分析装置
TA Instruments
⑲希釈冷凍機
（装置
開発棟）
化学試料棟前
渡り廊下
<2 階>
⑳液体窒素
レーザー棟
（化学
試料棟）
<1 階>
⑬ナノ秒レーザー
<1 階>
⑩蛍光X線分析装置
⑭蛍光分光光度計
⑯可視紫外分光光度計
⑰フーリエ変換
赤外分光光度計
⑱顕微ラマン分光装置
<地階>
③単結晶X線回折装置
南実験棟
機器センター
施設事務室
（1階111室）
控室
（1階113室）
（極端紫外光
実験棟）
東門
実験棟
研究棟
正面玄関
池

【 山手地区 】



【 明大寺 ― 山手 マップ 】



施設利用方法

１．概要

機器センターは、磁気・物性、化学分析、分子分光の研究に必要な種々の設備を保守・管理し、それら設備を公開しております。一部設備は、ナノテクノロジープラットフォーム事業を通じて提供しております（『所有設備一覧』を参照）。所外利用者の方には、設備の使用料は原則無料で公開しており、規定の範囲内ですが旅費も支給させていただきます。また共同利用研究者宿泊施設（有料）もご利用いただけます。

２．申込資格・利用形態

以下に所属する研究者（但し、大学院博士課程後期在学中の者を含む）が、当センターの設備を利用することができます。

- 国立・公立大学法人（高等専門学校を含む）
- 私立大学法人（　　　〃　　　）
- 国・公立研究所（独立行政法人を含む）等
- 所長が上記研究者と同等の研究能力を有すると認められた者
- その他、民間企業※

設備の利用には、協力研究、施設利用、技術代行※、技術相談※の 4 形態があります。ただし、利用できる形態は設備によって異なります。

- 協力研究　データ解析や学術的な議論を含めた設備の利用を所内研究者と共同で行います。
- 施設利用　利用者が設備を自ら操作、データ解析や学術的議論は利用者が独自に行います。
- 技術代行※　実験・測定を研究所スタッフに依頼して行います。
- 技術相談※　研究所スタッフと実験・測定について検討します。

※ ナノテクノロジープラットフォーム事業対応設備に限る

３．初めて利用される方

当センターを初めて利用される方は、利用申請の前に、設備担当職員宛に利用希望設備、実験内容、利用希望日等をお問い合わせください。

≪技術的な問い合わせ先≫
E-mail： ic-pub@ims.ac.jp　　　TEL：0564-55-7470

上記メールアドレスは、当センター設備担当職員全員に送られます。お問い合わせ内容に応じて、設備担当職員等から返信いたします。

4．利用方法

以下、施設利用について説明いたします。他の形態は所内対応者までお問い合わせください。

4．1 施設利用の利用方法（手順）

ナノ ：【ナノテクノロジープラットフォーム事業に対応する設備】を１つ以上利用する場合
【それ以外の設備】も併せてご利用頂けます。

機セ ：【それ以外の設備】のみを利用する場合

※申請により、手続き・提出書類・担当事務室が異なりますのでご注意ください。

(1) 申請

共同利用申請システム（https://imsapply.ims.ac.jp/apply/）による Web 申請となります。

ナノ 機器センター施設利用（ナノテクノロジープラットフォーム）

機セ 機器センター施設利用

なお、Web 申請完了後、「承諾書」の提出も必要です。
※「放射線業務従事承認書」が必要な場合も同様です。
≪送付先≫ 〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構　岡崎統合事務センター
総務部国際研究協力課　共同利用係（ 0564-55-7133 ）

(2) 採否の決定

採否結果は、登録メールへご連絡の上、採否結果通知書を郵送いたします。
※採否審査中は、設備の利用はできません。

(3) 来所計画

各設備担当職員と事前に十分打合せを行ってください。

(4) 設備予約

各設備の予約方法に従ってください。詳細は各設備担当職員までお問い合わせください。

(5) 宿泊予約（三島ロッジ　http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/）

ナノ ナノプラット室までご連絡ください。

機セ 各自でご予約ください。

(6) 事務手続き

ナノ ナノプラット室
〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構　分子科学研究所
TEL&FAX：0564-55-7337
Mail：knakane@ims.ac.jp
研究棟 3 階 313 号室

機セ 機器センター事務室
〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構　分子科学研究所
TEL：0564-55-7470　FAX：0564-55-7448
Mail：ic-office@ims.ac.jp
南実験棟 1 階 S111 号室

(7) 来所

(8) 利用記録の提出

(9) 報告書の提出

4．2 施設利用の利用方法（詳細）

(1) 申請

共同利用申請システム（https://imsapply.ims.ac.jp/apply/）よりアカウントを取得してください。

ナノ 「機器センター施設利用（ナノテクノロジープラットフォーム）」から申請してください。

機セ 「機器センター施設利用」から申請してください。

申請完了後、登録アドレスに「登録完了メール」が届きます。添付されている「承諾書」にご記入の上、送付願います。承諾書が届いて正式な申請となります。

単結晶 X 線回折装置、粉末 X 線回折装置、蛍光 X 線分析装置を利用する方は、承諾書と併せて「放射線業務従事承認書」を送付願います。

※半期毎（前期：4/1～9/30、後期：10/1～翌 3/31）の申請は、随時受け付けておりますが、通年（4/1～翌 3/31）の申請は、前年度 12 月の締め切りとなります。

≪送付先≫ 〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構 岡崎統合事務センター
総務部国際研究協力課 共同利用係（TEL：0564-55-7133）

(2) 採否の決定

申請受理から約 2 週間を要します。結果は、登録メールへご連絡の上、採否結果通知書を郵送いたします。

※採否審査中は設備の利用はできません。

図 1 Web 申請

(3) 来所計画

各設備担当職員と事前に十分打ち合わせて日程を確定してください。

※学部学生の来所は、指導教員の同行が必要です。

※大学院学生、および学部学生は、(財)日本国際教育支援協会「学生教育研究災害損害保険」および「学研災付帯賠償責任保険」または同等以上の保険への加入が必要となります。

ナノ 旅費必要の有無にかかわらず、下記事項をナノプラット室までご連絡ください。

1. 課題番号
2. 来所者名（ふりがな）
3. 来所日程
4. 旅費必要の有・無
5. 航空機利用の有・無
6. 宿泊（三島ロッジ、ホテル）
7. ロッジネットワークアカウントの要・不要

≪連絡先≫

ナノプラット室

TEL&FAX：0564-55-7337

Mail：knakane@ims.ac.jp

機セ 採択決定後の手続きは、機器センター事務室で対応いたします。

機器センター事務室

TEL：0564-55-7470　FAX：0564-55-7448

Mail：ic-office@ims.ac.jp

(4) 設備の予約

各設備の予約方法に従ってください。詳細は、各設備担当職員までお問い合わせください。

※大学連携研究設備ネットワーク予約システム（http://chem-eqnet.ims.ac.jp）を利用する場合は、アカウントが必要となります（『大学連携研究設備ネットワーク利用方法』を参照）。

(5) 宿泊予約

ナノ 三島ロッジへの予約は、ナノプラット室で承ります。予約後メールにてお知らせいたします。

機セ 三島ロッジへの予約は、各自でご予約願います。（http://www.occ.orion.ac.jp/lodge/）

※利用登録の際、『関係研究室』は［機器センター（分）］・［機器センター施設利用「施設利用申込書」申請者］を選択してください。

※ロッジの鍵の受け取りは、宿泊初日の11:00～15：30です。到着が15：30以降または土日祝日になる場合は、事前に各担当事務室へご相談ください。

※ロッジのチェックインは15：00、チェックアウトは9：30です。

※周辺ホテルは、各自でご予約ください。

(6) 事務手続き

(a) 旅費手続き

採択された金額の範囲内において自然科学研究機構旅費支給規程により支給致します。なお、口座登録の手続きは約 1 週間、振込までの所要日数は手続き後約 1 ヶ月かかります。

下記書類は、それぞれのホームページからダウンロードできます。

提出書類	提出が必要な方
銀行振込口座登録依頼書	初めて旅費請求される方
出張命令簿の写し	旅費請求される教職員の方（機セのみ）
出張報告書	旅費請求される全員
大学院生派遣書	旅費請求される大学院生の方（2 週間前までに提出）
航空機利用の領収書（原本）	航空機利用の方
搭乗券（往・復分半券）	

(b) その他必要書類

提出書類	提出が必要な方
学部学生派遣書	学部学生の方（来所ごと、2 週間前までに提出）
放射線業務従事承認書	放射線を利用される方で未提出の方（2 週間前までに提出）
放射線管理区域立入申請書（学部学生）	放射線を利用される学部学生で、「放射線業務従事承認書」を提出できない方（来所ごと、2 週間前までに提出）

≪提出先≫

ナノ　ナノプラット室
〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構　分子科学研究所
TEL&FAX：0564-55-7337
Mail：knakane@ims.ac.jp
研究棟 3 階 313 号室

機セ　機器センター事務室
〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
自然科学研究機構　分子科学研究所
TEL：0564-55-7470　FAX：0564-55-7448
Mail：ic-office@ims.ac.jp
南実験棟 1 階 S111 号室

(7) 来所

- 来所当日、守衛所で身分証明書を提示後、ネームプレートの交付を受け着用してください。
- 原則に申込者本人に使用していただきますが、必要に応じて設備担当職員が補助いたします。
- 三島ロッジを予約された方は、宿泊初日 11：00 ～ 15：30 までの間に、国際研究協力課共同利用係（事務センター棟 3 階）に来訪し、ロッジの鍵の受け取りと宿泊料金の支払いを済ませてください。
- ロッジチェックアウト後、鍵は返却ボックスへお返しください。
- 山手地区カードキーを希望される方は、平日 8：30 ～ 17：15 の間に、設備担当職員に申し出てください。
- 利用終了後は、使用ノート等に必要事項を記入の上、必ず設備担当職員に測定が終了した旨を報告してください。

(8) 利用記録の提出

ナノ　ご利用後は、『利用記録』を来所ごとに作成し、ナノプラット室へご提出ください。

≪提出先≫
ナノプラット室
Mail：knakane@ims.ac.jp

(9) 報告書の提出

ナノ　年度末に報告書等の提出をお願いしております。年度末が近付きましたら、申請代表者の方へご連絡させて頂きます。

※成果公開を見合わせる必要がある場合は、猶予することが可能です。事前に公開猶予とする理由をナノプラット室へご連絡ください。

機セ　利用期間終了日までに、施設利用実施報告書を提出してください。
(提出期限：前期 9/30、通年・後期 3/31)
Web 共同利用申請システムの「報告書提出」ボタンから、作成した報告書をアップロードしてください。

5．お問い合わせ先

- 技術的なお問い合わせ　⇒　TEL:（0564）55-7470
  Mail：ic-pub@ims.ac.jp

- 機器センター事務室　⇒　〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
  自然科学研究機構　分子科学研究所
  TEL：0564-55-7470　FAX：0564-55-7448
  Mail：ic-office@ims.ac.jp
  南実験棟 1 階 S111 号室

- ナノプラット室　⇒　〒444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38
  自然科学研究機構　分子科学研究所
  TEL&FAX：0564-55-7337
  Mail：knakane@ims.ac.jp
  研究棟 3 階 313 号室

- ホームページ　⇒　機器センター（ http://ic.ims.ac.jp ）
  ナノプラット（ http://nanoims.ims.ac.jp/ims/ ）

ナノテクノロジープラットフォーム事業について

１．概要

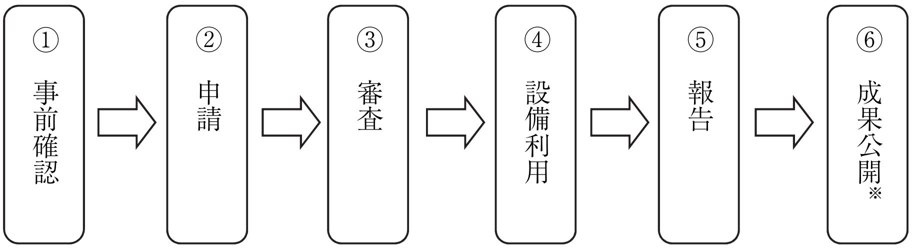
「ナノテクノロジープラットフォーム事業」は、ナノテクノロジーに関する最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して、全国的な設備の共用体制を共同で構築するものです。ナノテクノロジー関連科学技術において基本となる３つの技術領域（微細構造解析、微細加工、分子・物質合成）から構成されており、分子科学研究所は、「分子・物質合成」技術領域の代表機関として参加しています。

「分子・物質合成」領域では、産学官の研究者に対して、実施機関にある最先端の研究設備の利用機会を提供し、共同研究※、機器利用※、技術代行、技術相談を通じて、特異な機能や優れた特性を有する有機・無機材料・金属系ナノ材料の探索・開発のための分子・物質合成、構造解析、分子設計等を支援しています。

※ 分子子科学研究所においては、「共同研究」「機器利用」をそれぞれ「協力研究」「施設利用」として実施しています。

２．利用方法

詳細については、各実施機関にお問い合わせください。



※成果公開の猶予について

特許申請等の理由で利用者が公開の延期を希望する場合は、成果の公開を最大２年間延期できます。

３．問い合わせ先

- ナノテクノロジープラットフォーム
  ホームページ　⇒　https://nanonet.go.jp
- 分子・物質合成プラットフォーム
  ホームページ　⇒　http://nanoims.ims.ac.jp
- 分子科学研究所　分子・物質合成プラットフォーム
  ホームページ　⇒　http://nanoims.ims.ac.jp/ims/
  事務室　⇒　〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中 38 番地
  自然科学研究機構　分子科学研究所　ナノプラット室
  中根　香織
  E-mail： knakane@ims.ac.jp　TEL・FAX： 0564-55-7337

大学連携研究設備ネットワーク利用方法

１．概要

大学連携研究設備ネットワーク（以下、設備ネットワーク）とは、「全国の各大学が所有する研究設備の相互利用・共同利用を推進し、将来の新しい共同研究の促進」を目的としたプロジェクトです。現在、参加機関として分子研（全国事務局担当）の他、国立大学 72 機関、公・私立大学 30 機関、公的研究機関 3 機関、民間企業 23 機関が登録され、国立大学等 67 機関の提供する 385 の公開設備が利用されています。

機器センターの設備はこの設備ネットワークに登録されており、予約も設備ネットワークの予約システムを通じて行って頂いております。ここでは、機器センターの設備利用を前提とした利用方法について説明します。

２．利用方法

２．１ ホームページ

設備ネットワークのホームページは以下の通りです。ここから予約システムにログインします。

ホームページアドレス：

http://chem-eqnet.ims.ac.jp/

図１　設備ネットワークホームページ

２．２ アカウント

予約システムを使う為にはアカウントが必要です。アカウントをお持ちでない場合は問い合わせフォームよりお問い合わせ願います。

２．３ 利用の流れ

（1）予約

※利用者自身のアカウントで予約を行ってください。ただし、施設利用の場合は申請代表者が、協力研究の場合は所内受入担当者が、予約を行ってください。

（a）予約システム（http://chem-eqnet.ims.ac.jp/）にログインし、利用する設備を［利用予約］－［設備検索］から検索し、設備名をクリック（図 2）。

（b）設備詳細画面の［相互利用予約］をクリック（図 3）。

（c）利用日時・予算区分（運営費交付金）を選択し、［予約確認］をクリック（図 4）。続いて確認画面の［予約］をクリック。

図２　設備検索

図３　設備詳細画面

図４　予約テーブル

⑵　予約の確認、修正、取消

［予約状況］一覧で、現在の予約状況、および修正・取消が出来ます（図 5）。

「承認待ち」　：設備管理者が予約を確認中です。

「予約中」　　：設備の利用が出来る状態です。

ID	設備・設備コード	所属	予約期間	状態	操作
共10885	SQUID型磁化測定装置（Quantum Design社製 MPMS-7） S-IMS-IMS-IC-3	自然科学研究機構機器センター	2014/05/12 18:00 ～ 2014/05/12 19:00	承認待ち	修正 取消
共10884	SQUID型磁化測定装置（Quantum Design社製 MPMS-7） S-IMS-IMS-IC-3	自然科学研究機構機器センター	2014/05/12 17:00 ～ 2014/05/12 18:00	予約中	修正 取消
共10883	SQUID型磁化測定装置（Quantum Design社製 MPMS-7） S-IMS-IMS-IC-3	自然科学研究機構機器センター	2014/03/12 16:00 ～ 2014/03/12 17:00	完了	
共10877	SQUID型磁化測定装置（Quantum Design社製 MPMS-7） S-IMS-IMS-IC-3	自然科学研究機構機器センター	2013/11/19 01:15 ～ 2013/11/19 01:20	キャンセル	

図５　予約状況

２．４ アカウントについて

⑴　アカウントの変更

アカウント（ユーザーID、パスワード）は、ログイン後、［ユーザー情報修正］から、随時変更出来ます。

⑵　アカウントを忘れた方へ

ID・パスワードを忘れてしまった場合は、ログイン窓にある「ID、パスワードを忘れた方はこちら」のリンクをクリックしてください（図 6）。設定ページでメールアドレスと名前を入力するとシステムからメールが届きます。ID はメールに記載されています。パスワードは再設定用ページの URL が記載されていますので記載 URL にアクセスしてパスワードを再設定してください。

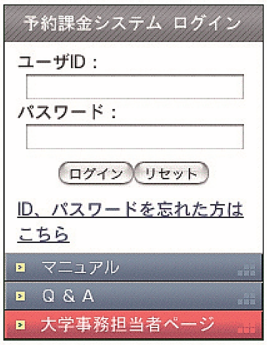


図６　ログイン窓

※　予約システムの操作の詳細はマニュアルをご覧ください。

（マニュアル URL：http://chem-eqnet.ims.ac.jp/manuals/）

液体ヘリウム利用方法

1．概要

現在、明大寺地区および山手地区のヘリウム液化機は順調に稼働しています。液体ヘリウム供給方法については以下の通りご案内します。

従来の利用方法を踏襲して、予め液体ヘリウム充填済みのベッセルを何台か用意させて頂き、ベッセルの持ち出し及び返却で液体ヘリウムをご利用頂くシステムの変更はございません。ただし、研究室所有の専用容器への供給はセルフ方式となりますので、ご了承ください。

以下では、現在行われている利用方法を中心に記しておきます。その他、利用規程や液体ヘリウム取り扱い上の注意等につきましては、機器センターホームページ内の液体ヘリウム利用者のためのマニュアル（http://ic.ims.ac.jp/kiki/He_user_manual2008.pdf）に詳しく書かれておりますので、ご参照頂ければ幸いです。

山手地区での液体ヘリウムご利用方法については以下の「山手地区液体ヘリウム利用方法」をご参照ください。

2．液体ヘリウム利用の前に

- 液体ヘリウム使用者は、「液体ヘリウム利用者講習会」を受講し、液体ヘリウム利用者として登録すること。（必要があれば「液体ヘリウム利用者講習会」は随時行う）
- 実験室のヘリウム回収配管を利用する場合、早めに機器センターの寒剤担当者に連絡すること。

3．明大寺地区液体ヘリウム利用方法

3．1　設置場所

- 極低温棟1階105室

3．2　ベッセル持ち出し手順

（1）　所定の場所にあるベッセルを手前から順に持ち出す。
（2）　備え付けの「ベッセル持ち出し・返却入力用パソコン」の画面の「持出」にタッチする。
（3）　スキャナーでユーザーコードを読み取り、次に容器コードを読み取り、「確認」にタッチする。
（4）　ベッセルを持ち出す。

3．3　ベッセルの返却手順

（1）　ベッセルをロードセル中央に載せる。
（2）　パソコンの画面の「返却」にタッチし、スキャナーで容器コードを読み取り、「計量」にタッチする。
（3）　ベッセルを返却場所に置き、回収配管につなぐ。
（4）　返却完了。

4．山手地区液体ヘリウム利用方法

4．1 設置場所

- 山手４号館207号室

4．2 ベッセル持ち出し手順

(1) 所定の場所にあるベッセルを持ち出す。
(2) 液体ヘリウム自動計量装置のコントローラー付属のスキャナーでユーザーコード及び容器コードを読み取る。
(3) ベッセルをロードセルに載せる。
(4) 「持出」ボタンを押し、ベッセルを持ち出す。

4．3 ベッセルの返却手順

(1) ベッセルをロードセル中央に載せる。
(2) スキャナーで、ユーザーコード及び容器コードを読み取る。
(3) 「返却」ランプが点滅するので、「現在量」の表示が安定したら「返却」ボタンを押す。
(4) 容器を返却場所に置き、回収配管につなぐ。
(5) 返却完了。

5．異常時

異常時は、直ちに機器センター寒剤担当者（明大寺地区：内線：7471または4553、携帯：090-4082-6162、山手地区：内線：5516、携帯：090-9025-1928）に連絡すること。

6．その他

- 供給可能時間は、充填済みの持ち出すベッセルがある場合は終日可能である。
- 研究室で所有するベッセルも上記方法で利用可能である。
- 使用期間の長期化は、貸し出し容器の不足が発生し液体ヘリウムの供給に支障が出るため、容器はなるべく早めに返却すること。
- 液体ヘリウムは必ず５ℓ以上残した状態で返却すること。
- ヘリウムの回収ロスが直接供給価格に反映されるため、蒸発ガスの回収100％を心がけること。
- 回収ガスに、なるべく空気を混入させないように十分注意すること。
- ベッセルへの空気混入は絶対に避けること。
- 液体ヘリウム供給価格：平成25年度前期　１ℓ当たり182円。

液体窒素利用方法

１．概要

液体窒素の汲み出しは、セルフサービス及び自動供給・自動計量です。液体窒素に関しては、大学で死亡事故もあり、ユーザーが液体窒素を安心して利用するためには、単に供給装置の利用講習だけでなく液体窒素自体の安全教育も重要です。

明大寺地区液体窒素利用者のためのマニュアルは､機器センターホームページ(http://ic.ims.ac.jp/kiki/N2_user_manual2011.pdf) にあります。当マニュアルには、分子研における液体窒素汲み出しの手順だけでなく、液体窒素を取り扱う上での注意点や液体窒素容器の種類と使用方法についても詳細に書かれておりますので、是非ご参照ください。

なお、山手地区での汲み出し手順は明大寺地区と少し異なりますので、以下の「山手地区液体窒素汲み出し手順」の項をご覧ください。

以下では、要点を抜粋し、簡単に記しておきます。

２．特に注意すべき点

- 凍傷を防ぐ：保護眼鏡、革手袋を使用すること。
- 酸欠を防ぐ：実験室内の換気に注意すること。
- 爆発を防ぐ：容器を密封しないこと。

３．液体窒素容器について

- 容器には開放型と密封型があり、密封型を使用するときは取扱説明書をよく読んでおくことが必要である。
- 容器を購入する場合、あらかじめ供給が可能な容器かどうかを寒剤担当者に確認すること。
- 容器は登録しなければ使用できない｡登録した容器には容器バーコード(ベッセルバーコード)が発行される。

４．液体窒素汲み出しの前に

- 毎年年度初めに実施される「液体窒素利用者講習会」に参加申請し、受講する。この時受講できなかった人は後日随時液体窒素利用者講習を実施するので寒剤担当者に連絡する。
- 受講修了者にはユーザーバーコードが発行される。

５．明大寺地区液体窒素汲み出し手順

５．１　汲み出し場所

- 化学試料棟２階入り口の渡り廊下
- 極低温棟 105 室（大型容器充填専用）
- UVSOR 棟地階（UVSOR 利用者専用）

5．2 手順

(1) 容器をロードセルに載せフレキシブルチューブを挿入する。（革手袋着用のこと）
(2) ベッセルバーコードとユーザーバーコードをバーコードリーダーで読み取る。
(3) 操作画面上の「START」にタッチすると充填が開始する。満量充填でも必要量充填でも可能。
(4) 充填終了時、電子ブザーが鳴る。
(5) 容器をロードセルから降ろすと電子ブザーが止まる。

5．3 注意

異常時は緊急閉止弁を閉め、直ちに緊急時連絡先（内線：7471 または 4553、携帯：090-4082-6162）に連絡すること。

5．4 その他

- 汲み出しの時間は、原則平日午前 9 時～午後 5 時までである。
- 無登録の所外研究者（液体窒素利用者講習会未受講者）が液体窒素の汲み出しを行う場合は、「液体窒素利用者講習会」受講修了者立ち会いのもとで行うこと。
- エレベーターに人と液体窒素容器とを同乗させてはいけない。
- 液体窒素供給価格：平成 25 年度前期　1ℓ当たり 62 円（明大寺地区）。

6．山手地区液体窒素汲み出し手順

6．1 汲み出し場所

- 山手 4 号館 2 階液体窒素供給室

6．2 手順

(1) 容器をロードセルに載せフレキシブルチューブを挿入する。（革手袋着用のこと）
(2) 容器バーコードとユーザーバーコードをコントローラー付属のバーコードリーダーで読み取る。
(3) コントローラーの「開始」ボタンが点滅する。
(4)「開始」ボタンを押すと充填が開始する。
(5) 充填途中で止めたいときは「停止」ボタンを押す。
(6) 充填終了時、電子ブザーが鳴る。
(7) 容器をロードセルから降ろすと電子ブザーが止まる。

6．3 注意

異常時は直ちに緊急時連絡先（内線：5516、携帯：090-9025-1928）に連絡すること。

6．4 その他

- 汲み出しの時間は、原則午前 7 時～午後 7 時までである。
- 「液体窒素取り扱い講習」を受けていない人は、汲み出すことはできない。
- エレベーターに人と液体窒素容器とを同乗させてはいけない。
- 液体窒素供給価格：平成 25 年度前期　1ℓ当たり 85 円（山手地区）。

小型貸出機器利用方法

1．概要

小型貸出機器として、各種実験に利用できる汎用性の高いものを保有しています。共同利用機関であり流動性も高い分子科学研究所においては、一時的に使用できる機器を備えておくことは、無駄な投資を防ぐ意味でも有用であるといえます。例えば、共通性の高い機器として、電源・ボックスカー・発振器・エレクトロメーターなどがあり、また光スペクトラムアナライザー・オシロスコープなどの高価なものも備えています。現在は 88 台を保有しておりますが、その約 80%は貸出されている状況です。所内の方のみの貸出とさせて頂いておりますが、所外の方でも施設利用や協力研究等の実験の際に、所内の方を通じて利用して頂くことは可能です。

保管場所は、H24 年度より「南実験棟地下１階 B10」になりました。

2．利用方法

利用の手続きについては、小型貸出機器専用の利用・予約システム http://haruka.ims.ac.jp/kogata/yoyaku/kogatayoyaku.htm から、クリック操作で簡単に行えるようになっています(図1参照)。画面の内容に従って進んで頂ければ、機器の予約や利用の手続き、検索閲覧ができます。既に利用、あるいは予約されている機器の場合であっても、同様に手続きをして頂ければ、利用して頂けるよう当センターで出来る限り日程調整をさせて頂きます。貸出期間については、原則２週間とさせて頂いていますので、返却予定日を設定される方は利用開始日から２週間以内の日を入力してください。返却予定日が決まっていない場合は、「継続使用を希望」と設定して頂ければ新たな予約が入るまで継続してご利用頂けます。但し、利用期間が２週間以上経過している場合に、新たな予約が入った時点で、出来る限り速やかに返却して頂くようお願いしております。返却の際も、同ページから返却手続きを行うことができます。また、本予約システムをご利用頂くほかに、お電話やメール、或いは直接声を掛けてご連絡頂いても構いません。なお、

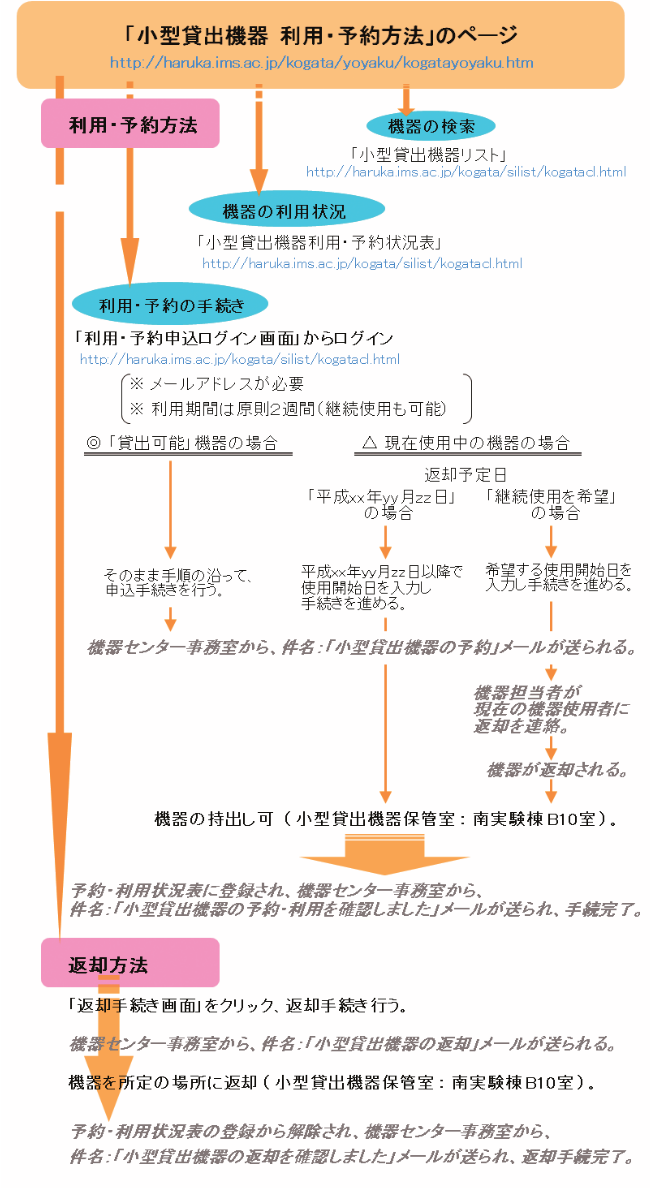


図１　利用・予約・返却方法の手順

利用の際の機器の持ち出し、及び返却は、利用者ご自身でお願いします。参考までに、小型貸出機器のリスト（機器名別）を表１に示します。詳細は、http://haruka.ims.ac.jp/kogata/silist/ kogatacl.html をご参照ください。

お気軽に、ご利用ください。

表１　小型貸出機器（88 台）機器名別リスト

機器名	台数	機器名	台数
ロックイン増幅器	5	標準ハロゲンランプ	1
ボックスカー積分器	22	波長較正用水銀ランプ	1
広帯域前置増幅器	4	デジタルフォトメーター	1
高速電流増幅器	1	パルスウェーブメーター	1
ユニバーサルカウンター	1	光スペクトラムアナライザー	1
関数信号発信器	1	デジタルオシロスコープ	4
ファンクションジェネレーター	1	オシロスコープ用高圧プローブ	1
ファンクションシンセサイザー	1	直流定電圧／定電流電源	5
Synthesized Sweeper	1	2 出力直流定電圧電源	1
任意波形発生器	1	直流安定化電源	1
デジタルディレイジェネレーター	6	高圧安定化電源	10
デジタルマルチメーター	4	X-Y-t 記録計	2
デジタルボルトメーター	1	データロガー	1
シングルモノクロメーター	1	時間軸較正器	1
水銀ランプ	1	C.F.ディスクリミネーター	1
キセノンランプ	1	フラックスゲート型磁力計	1
重水素ランプ	1	ライトチョッパー	1
分光光度計波長較正用ランプセット	1		

サンプル準備室利用方法

１．概要

機器センター設備の利用時、測定可能な状態での試料持ち込みを推奨しますが、来所後に試料調整や準備が必要な場合、サンプル準備室（明大寺地区・極低温棟 201 号室）をご利用いただけます。

２．利用方法

- 利用の都度、ノートに記入をお願いします。
- 予約制ではありませんが、利用予約が必要な場合は、担当者までご連絡ください。
- 長時間場所を離れる場合や、危険物等がある場合は、付箋等で分かるようにしてください。
- 整理整頓を心がけてください。
- 廃液処理は各自で行ってください。

２．１ 設置設備

- 真空ライン（自作、[真空度]（RP）～3 Pa、（DP）～10^{-4} Pa、[接続] TS15/25、ϕ6 mm 管）
- ドラフトチャンバー（Yamato KFC2180）
- グローブボックス（IUCHI、ガス置換可能、真空引き不可）
- 定温恒温乾燥機（EYELA NDO-400）
- 超音波洗浄機（アズワン US-1R）
- 天秤（島津 UW620H）

真空ライン

ドラフトチャンバー

施設利用者控室

１．概要

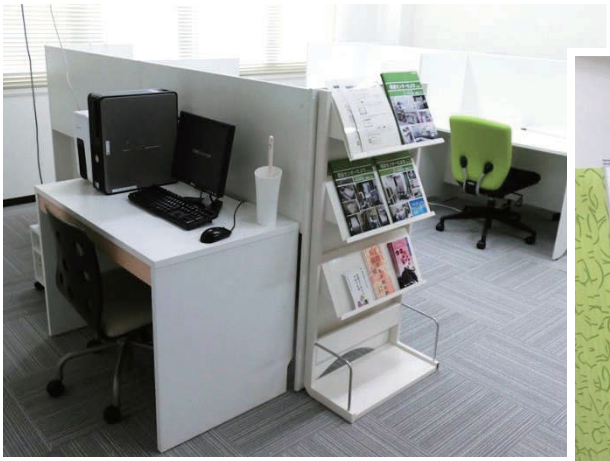
明大寺地区における機器センターの設備は、極低温棟と南実験棟にほぼ集約されています。

施設利用者控室を、極低温棟 2 階 202 号室、および南実験棟 1 階 113 室に設けております。会議机やホワイトボード、個人用机も用意しておりますので、打ち合わせや測定の合間の休息にご利用ください。また共用パソコンもご利用いただけます。なおパソコン持込みの場合、ネットワーク接続に必要なアカウントも発行可能です。ネットワーク利用上の注意に従ってご利用ください。

当センターの施設利用者の方であれば、どなたでもご利用いただけますが、利用の際は、設備担当者、あるいは機器センター事務室（南実験棟 1 階 111 号室）まで声をかけてください。

お気軽に、ご利用くださいませ。

極低温棟 2 階 202 号室



南実験棟 1 階 113 号室

電子スピン共鳴（ESR）装置

概要

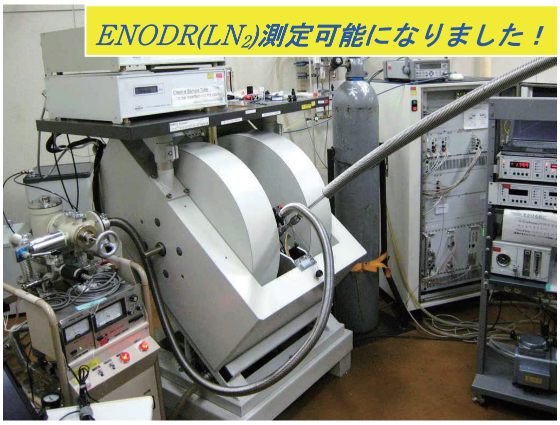
電子スピン共鳴（ESR）装置は、不対電子（電子スピン）をプローブとした分光装置である。

静磁場中に置かれた電子スピンはエネルギー準位が分裂し、一定のマイクロ波を加えながら静磁場を掃引すると、このエネルギー差に相当する磁場で共鳴が起こる。この共鳴磁場や吸収強度などの観測から、電子スピンを持つ原子や分子の量、構造、電子状態などに関する情報が得られる。ESR 装置は、有機ラジカルや遷移金属などを含む物質の物性研究の他にも、放射線や酸化などにより不対電子が生じた岩石や食品の評価、触媒や重合反応などのプロセス追跡にも利用される。

設備紹介（EMX Plus、E500）　ナノプラット　担当）藤原　基靖

メーカー：Bruker
型　　式：EMX Plus
導入年度：平成 17 年度
（主な仕様）

周波数	X-band（～9.4 GHz）
マグネット	-5 mT～1.45 T
共振器	高感度（Q～9000） デュアルモード 二重矩形、光透過
温度可変	(ESR900) 3.8～300 K (ER4131VT) 100～300K［LN_2］ RT～500K［Air］
オプション	テスラメーター ゴニオメーター 光照射



メーカー：Bruker
型　　式：E500
導入年度：平成 10 年度
（主な仕様）

周波数	X-band（～9.4 GHz）
共振器	ENDOR、※他は EMX と共用
温度可変	(ESR900) 3.8～300 K (ESR910) 1.5～300 K (ER4131VT) 100～300 K［LN_2］
周波数	Q-band（～34 GHz）
温度可変	4～300 K（CF935）

（共通部）

マグネット	-5mT～1.45T
オプション	テスラメーター ゴニオメーター、光照射

特徴

- EMX では、磁場・シグナル強度ともに 24bit 対応で高解像度測定が可能。
- E500 では、CW-ENDOR 測定（LHe および LN_2）も可能となった。また X-band に加え Q-band での高分解能測定も可能。
- EMX、E500 とも、X-band では、高感度、デュアルモード（許容・禁制遷移の観測）、二重矩形（定量・g 値較正）、光透過の各種共振器を、測定に応じて選択でき、温度可変測定にも対応している。

測定方法

- 粉末、液体の場合は、石英管（X-band：外径 ϕ4 mm、長さ 250 mm、Q-band：外径 ϕ2 mm、長さ 100 mm）に試料を封入。
- 単結晶の場合は、少量のアピエゾン N グリースで石英棒に固定。

備考

毎月マシンタイム打合会にて、翌月の予約を調整している。当月 1 日より、空いているマシンタイムは随時予約可能。

設備紹介（E680）　ナノプラット　　担当）藤原　基靖

メーカー：Bruker
型　　式：E680
導入年度：平成 10 年度
（主な仕様）

周波数	W-band（～94 GHz）［cw、pluse］
マグネット	3.8～300 K
共振器	超伝導マグネット（6 T スプリット型） 掃引コイル（700 mT）
周波数	X-band（～9.4 GHz）［cw、pluse］ Q-band（～34 GHz）［pluse］
温度可変	4～300 K（CF935）
マグネット	-5 mT～1.45 T
オプション	ゴニオメーター テスラメーター ENDOR 用 RF アンプ ナノ秒波長可変レーザー

特徴

X-、W-band の cw 測定の他、X-、Q-、W-band のパルス測定が可能。時間平均を観測している cw 測定に対して、パルス測定ではスピンダイナミックスを直接観測できる。ENDOR 測定（X-、Q-band）や ELDOR 測定（Q-band）にも対応しており、核スピンや電子スピンの緩和時間などのダイナミクスの直接測定や、電子スピン間の相互作用の強さから距離情報も得られる。またナノ秒波長可変レーザーの導入により時間分解測定（X-band）も可能となった。

測定方法

W-band では、石英管（外径 ϕ0.9 mm）に試料を封入。

備考

利用は、「高周波・高磁場およびパルス ESR の使用経験があること」が条件。

SQUID 型磁化測定装置

概要

磁場または温度を変えながら磁化測定を行い、物質の磁気特性を調べる装置である。微少な磁化変化を検出できるよう SQUID（超伝導量子干渉素子）を用いている。有機磁性体の研究、超伝導体の新素材研究や記録媒体の評価など、磁気物性や材料工学などの広い研究分野で利用されている。

設備紹介（MPMS-7、MPMS-XL7）　ナノプラット　担当）藤原　基靖

メーカー：Quantum Design
型　　式：MPMS-7
導入年度：平成 7 年度
（主な仕様）

温度範囲	1.9～400 K 350～800 K（オーブン使用時）
超伝導磁石	7 T （液体窒素ジャケット付）
トランスポート	スタンダード、RSO
オプション	サンプルスペースオーブン マグネットリセット 垂直試料回転用ロッド

メーカー：Quantum Design
型　　式：MPMS-XL7
導入年度：平成 14 年度
（主な仕様）

温度範囲	1.9～400 K
超伝導磁石	7 T
トランスポート	スタンダード
オプション	AC 測定 （周波数：0.1 Hz～1 kHz） （交流磁場：～6 G） 超低磁場 マグネットリセット 外部機器制御ソフト（EDC）

（MPMS-7、-XL7 共用オプション）

共用オプション	光照射用ロッド 圧力セル用ロッド 電気抵抗測定用ロッド

特徴

- 測定はシーケンス（測定プログラム）に従って自動的に行われる。
- 4.2 K 以下において時間制限なく温度保持でき、4.2 K を狭んで滑らかな温度変化が可能。
- 光照射や圧力下における磁化測定が可能。
- MPMS-XL7 では、AC 測定により、緩和時間等・スピンのダイナミックスを調べることが可能。また超低磁場オプションおよびマグネットリセットにより、サンプル中心における残留磁場を 50 mG 以下に抑えた低残留磁場中での測定が可能。

  EDC により、電流源とナノボルトメーターを用いた電気抵抗測定など、外部機器の制御・データ取込が可能。

測定方法

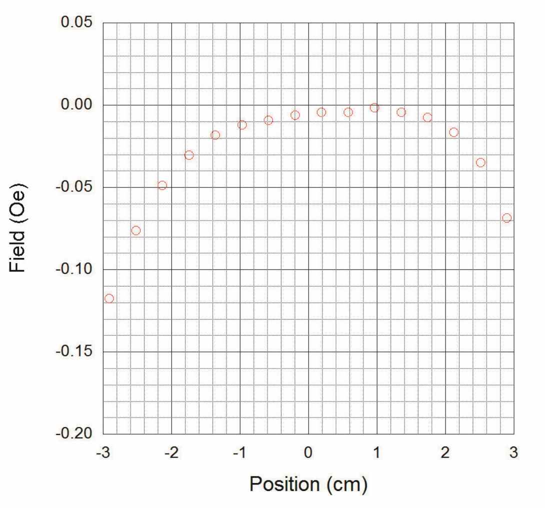
- ストローの中央にサンプルを固定。サンプル形状等により、カプセルやラップ、アルミホイルなどを利用。上記以外に必要なものは、各自で用意すること。
- サンプル交換は、300 K で行うこと。
- 終了時に LHe トランスファーを行い、満タンにすること。（MPMS-7 の場合、週末利用者は、LN2 トランスファーも行うこと。）

備考

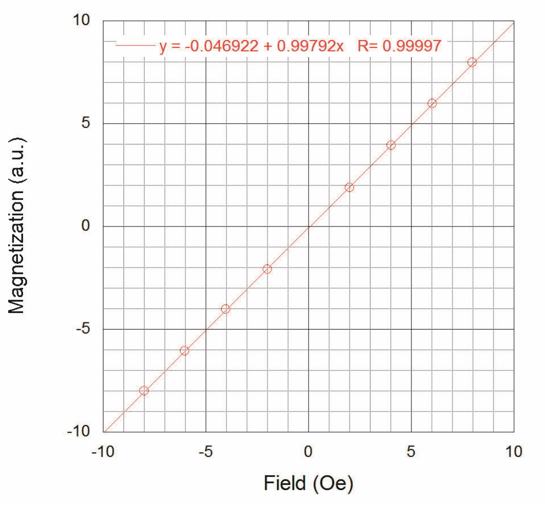
- He レベルは、超伝導磁石を冷却するために 40%以上に保持する必要がある。特に高磁場をかける場合は、He レベルに注意すること。

He Level	使用可能な最大磁場
50～100 %	7 T
40～50 %	1 T
40 %以下	実験不可

- マシンタイムの切り替えは、午前 10 時。
- 毎月マシンタイム打合会にて、翌月の予約を調整している。当月 1 日より、空いているマシンタイムは随時予約解禁。



磁場勾配プロファイル



磁化の磁場依存姓

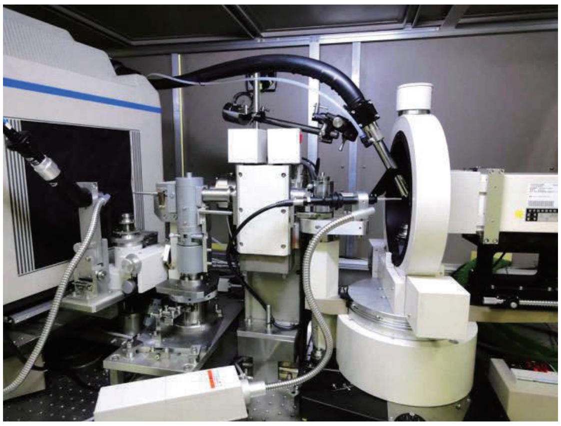
単結晶 X 線回折装置

概要

単結晶試料に X 線を入射すると、結晶構造を反映した回折点が得られる。この回折点の位置および強度から、結晶構造解析が行われる。構造解析により、原子の三次元座標（立体構造）や原子間距離・結合距離、三次元の電子密度などの情報が得られる。

数十～数百μm サイズの単結晶試料が作成出来れば、3 時間程度で測定～解析が行える。

設備紹介（MERCURY CCD-1・R-AXIS Ⅳ、MERCURY CCD-2）　担当）藤原　基靖



メーカー：Rigaku

型　　式：MERCURY CCD-1・R-AXIS Ⅳ、MERCURY CCD-2

導入年度：平成 8 年度

（主な仕様）

X 線源	回転対陰極型、Mo 50kV・100mA（5 k W）

（CCD1、CCD-2）

コリメータ	ϕ0.3、0.5、1.0 mm
ゴニオメータ	AFC-7 型 χ サークル
検出器	Mercury CCD
温度可変	100～400 K
ソフトウェア	測定:Crystal Clear 解析:Crystal Structure

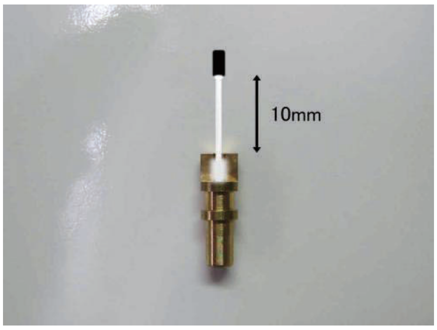
（R-AXIS）

コリメータ	ϕ0.3、0.5 mm
ゴニオメータ	一軸回転（ϕ 軸）
検出器	平板 IP（2 枚）
ソフトウェア	測定:RAPID 解析:teXsan

測定方法

- マウント

0.1～0.5 mm 角の単結晶を、ビットに取り付けたガラス棒の先端、またはマグネット台座付サンプルループに、接着剤・ワセリン等で固定。（ゴニオヘッドは、ビット用とマグネット用があり、CCD-1、-2、-3 で共用可能）



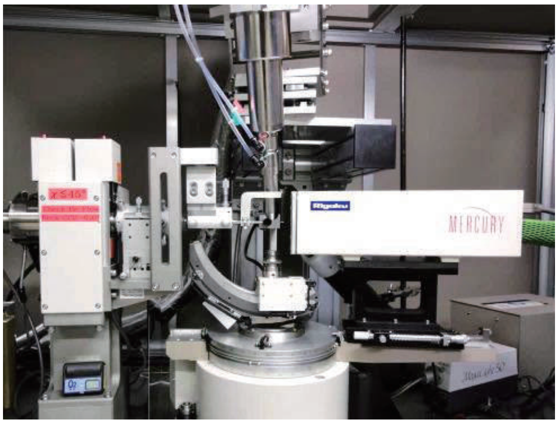
- X 線の立上げ・停止

手順書に沿って、使用の度に X 線の立上げ・停止を行うこと。

- 温度可変測定

PSA を起動させ、1 時間程度おいてから、冷却を始める。最低温 100 K まで、約 2 時間かかる。

設備紹介（微小結晶/MERCURY CCD-3）　担当）岡野　芳則



メーカー：Rigaku
型　　式：MERCURY CCD-3
導入年度：平成 14 年度
（主な仕様）

X 線源	回転対陰極型、Mo 50kV・16mA (0.8 kW) コンフォーカルミラー使用
コリメータ	ϕ0.3 mm
ゴニオメータ	AFC-8 型　1/4 χ サークル
検出器	Mercury CCD
温度可変	・100 K～室温 （N2 ガス：PSA より供給） ・24～100 K （He ガスボンベ:1 本/8 時間）
ソフトウェア	測定：Crystal Clear 解析：Crystal Structure

特徴

- 高輝度 X 線

光学系にコンフォーカルミラーを用いており、CCD-1、-2 に比べ、約 10 倍の高輝度 X 線ビームが得られ、測定が難しかった微小結晶でも測定が可能。ビーム径は ϕ0.1～0.2 mm で、コリメータはバックグラウンド低減のためビーム径よりやや大きめの 0.3 mm のものが取り付けてある。

- 低温測定

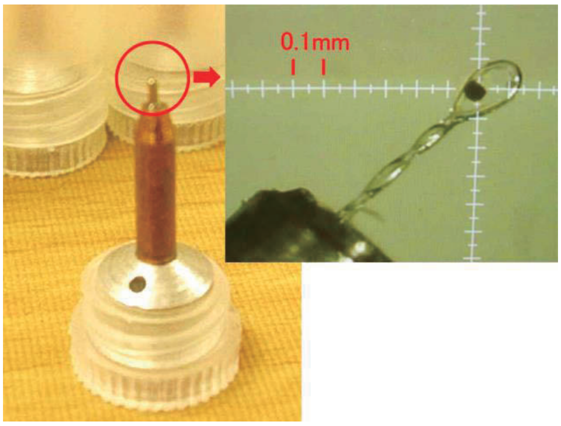
ガス吹き付け型の冷却装置で、到達温度は、N_2 ガスモードで 100 K、He ガスモードで 24 K（実測）。到達時間は、N_2 で 240 分、He で 150 分かかる。運転モードの切り替えは、He から N_2 には迅速に切り替え可能だが、N_2 から He の場合は、冷凍機を一旦室温に戻す必要がある。

N_2 ガスは PSA、He ガスはボンベからの供給で、He ボンベは稼働中でも交換可能。He ガス使用の場合、所内利用は実費が必要。

測定方法

- マウント

0.1～0.2 mm 角以下の単結晶を、マグネット台座付サンプルループに、ワセリン等で固定する。



その他

ケンブリッジ結晶構造データーベース（CSD）が利用可能。ID・Password等、詳細は担当者まで。

粉末Ｘ線回折装置

概要

粉末試料にＸ線を照射し、回折されたＸ線の角度および強度を測定する。主な利用法は定性分析（同定）である。既知試料の回折パターン（PDF：Powder Diffraction File）と照合することで測定試料の同定を行う。その他にも、ピークの有無や強度による結晶性や配向評価、ピーク幅による結晶子サイズ評価、小角領域の測定による粒子径の評価などにも用いられる。また測定精度によっては未知構造解析も可能である。

設備紹介（RINT-Ultima III）　担当）藤原　基靖

メーカー：Rigaku
型　　式：RINT-UltimaⅢ
導入年度：平成17年度
（主な仕様）

Ｘ線源	Cu管球 40 kV・40 mA（2 kW）
光学系	集中法、平行ビーム法、小角散乱
ゴニオメータ	θs/θd連動、 θs単独、θd単独 −3〜+154 deg.（2θ）
検出器	シンチレーションカウンタ
オプション	モノクロメーター 高分解能PSA 回転試料台 キャピラリ回転試料台 小角散乱試料台 低温試料台（40〜300 K）

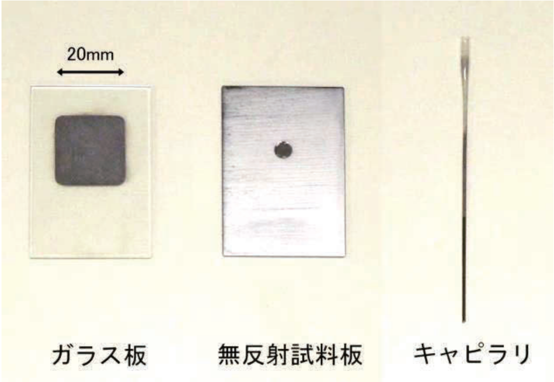
制御PC	Windows XP
ソフトウェア	JADE7+ Nano-Solver

特徴

- CBOユニットにより、集中法、平行ビーム法、小角散乱光学系の切り替えが可能
- 平行ビーム法により、試料成形の難しい試料でも、容易に測定可能
- 小角散乱測定により、ナノ粒子の粒径分布を求めることが可能（1〜50 nm）

測定方法

- 試料準備
  ガラス板やキャピラリ等に試料を充填



X 線光電子分光（XPS）装置

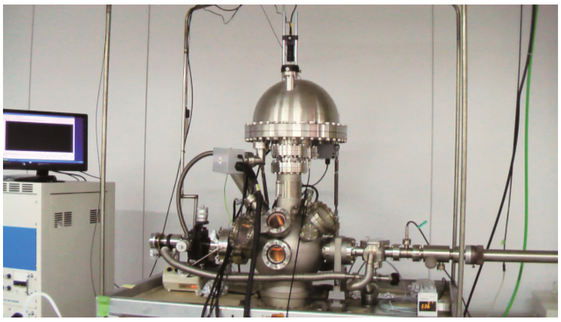
概要

X 線光電子分光（XPS: X-ray Photoelectron Spectroscopy）装置は、超高真空中で試料に X 線を照射し、放出される電子（光電子）を検出する装置である。放出される光電子は、対象となる原子の内殻電子に起因するものであり、そのエネルギーは元素ごとに定まることから、エネルギー値を知ることで定性分析を行うことができる。原子の置かれている環境（化学状態）によって電子状態が変わることからピーク位置が僅かにシフトすることを利用して、化学構造解析を行うことができることから ESCA（Electron Spectroscopy for Chemical Analysis）とも呼ばれる。

特徴として ①水素、He 以外の全ての元素が検出できる ②化学状態に関する情報を得ることができる ③極表面（数 nm 程度）の情報を得ることができる ④導体だけでなく、絶縁物も測定可能である ⑤エッチング装置と併用することで深さ方向分析が可能 が挙げられる。有機物などの絶縁物の場合には徐々に正に帯電するチャージアップ現象が起きてしまうことがあるので、測定試料の固定方法を工夫する必要がある。

XPS は、絶縁物から導体まで幅広くほとんどの材料に対して分析可能なことから、さまざまな表面物性の関係する場面で使用され、主な用途として、半導体や金属などの無機物から有機物までほとんどの材料について、極表面の組成、化学状態解析、汚染解析などが行われている。また、表面改質や接着・剥離解析など表面が関与する数多くの物性や機能の評価にも用いられている。

設備紹介（EA-125）　ナノプラット　担当）酒井　雅弘



メーカー：Omicron
型　　式：EA-125
導入年度：平成 23 年度
（主な仕様）

電子分光器	静電半球型 125mm、電子レンズ（静電+磁気レンズ）
X 線源	ツインアノード（Mg, Al），分光器なし。出力 15kV, 20mA（Mg）または 15kV, 34mA（Al）。

エネルギー分解能と計数率	Mg-K α 線を用いた清浄化処理を行っていない銀板の $Ag3d_{5/2}$, Entrance Slit 6 × 12mm, 半分値幅は, パスエネルギー10eV で 0.9eV（計数率 5500cps），パスエネルギー50eV で 1.4eV（計数率 60000cps）。図 1（a），（b）参照。
Entrance Slit	（1）6×12 mm （2）φ6mm （3）φ2mm （4）φ1mm （5）1×12 mm
真空度	4×10^{-8}Pa 程度（測定槽主排気はイオンポンプ、粗引きはターボ分子ポンプ）

装備機器	Ar イオンスパッタガン(2014年度より公開予定)
制御系	OS: Windows XP, 制御ソフト: Omicron EIS。データの持ち帰りは、テキストファイル形式など。

測定例

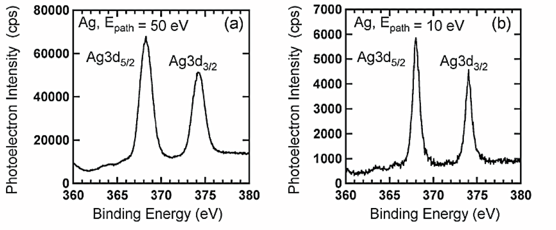


図１　Mg-Kαによる清浄化処理を行っていない銀板のAg3d5/2の光電子スペクトル。(a)パスエネルギー50eV,(b)パスエネルギー10eV

図 1 に清浄化処理を行っていない銀板の$Ag3d_{5/2}$の光電子スペクトルを示す。X 線源はMg, X 線出力 15kV20mA(300W), Entrance Slit 6×12mm の条件下で(a)パスエネルギー50eV,(b)パスエネルギー10eV で測定した。半分値幅はそれぞれ 1.4eV,0.9eV であった。

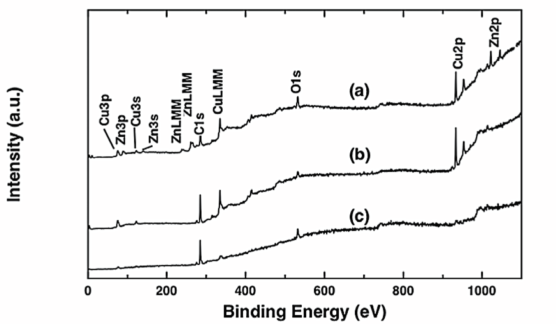


図２　銅板および真鍮板の光電子スペクトル。(a)ピカール研磨された真鍮板, (b)ピカール研磨された銅板, (c)未研磨の銅板

図 2 に銅板および真鍮板の光電子スペクトルを示す。(c)の未研磨のものは、表面付着物により Cu 由来のピークが非常に小さい。(b)は表面研磨により表面付着物がある程度除去できたため Cu 由来のピークがはっきり見えるようになった。(a)でも研磨により表面付着物がある程度除去できたため、真鍮の構成元素である Cu, Zn が観測されている。(a), (b), (c)のいずれにもC1s, O1s が観されているが、これは大気中の C, O が表面に付着していることを示している。これら大気由来の元素の除去は、真空中での Ar イオンスパッタリングが必要となる。

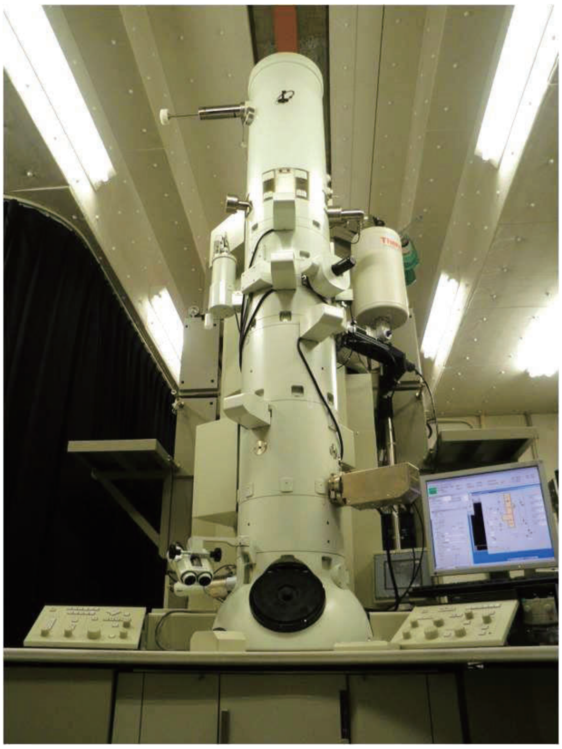
電子顕微鏡

概要

電子顕微鏡は、電子線を試料に当てて拡大像を観察する装置で、大きく分けて透過型電子顕微鏡と走査型電子顕微鏡の 2 種類がある。透過型電子顕微鏡では試料を透過した電子によって得られる拡大像を観察し、走査型電子顕微鏡では試料からの反射電子や二次電子を用いて表面構造を観察する。入射する電子線と試料との間では、相互作用によって様々な情報が放出されており、これらを利用することで結晶構造や化学組成等も調べることができる。

集束イオンビーム加工装置は、細く絞ったイオンビームを当てて試料を加工する装置で、電子顕微鏡用の試料作製等に用いられる。集束イオンビームを用いることで、試料表面の様子の観察や、試料への蒸着も行うことができる。

設備紹介（高分解能透過型電子顕微鏡(TEM)/JEM-3100FEF） ナノプラット 担当）上田　正



メーカー：JEOL
型　　式：JEM-3100FEF
導入年度：平成 14 年度
（主な仕様）

加速電圧	300 kV
分解能	0.17 nm（粒子像）
倍率	×2,500～1,500,000

特徴

電界放出形電子銃（FEG）とインカラム式オメガフィルターを備えているため、高分解能で明瞭な像を得ることが可能。高感度カメラシステムも備えている。

測定方法

試料は電子顕微鏡用グリッド（直径 3 mm）に載せるため､試料が大きい場合には､直径3 mm以下にする必要がある。また、試料を電子線が透過できる厚さ（～100 nm）に加工する必要がある。高倍率で観察する場合には、数 10 nm の厚さにする。

電子顕微鏡用グリッドは、様々な材質、規格、支持膜のものを備えている。

設備紹介（走査電子顕微鏡(SEM)/JSM-6700F(1)、JED-2201F）ナノプラット　担当）中尾　聡

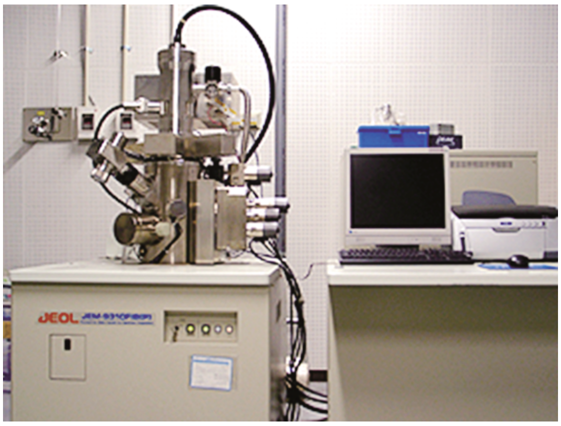
メーカー：JEOL
型　　式：JSM-6700F(1)、JED-2201F
導入年度：平成 14 年度
（主な仕様）

電子銃	冷陰極電界放射形
加速電圧	0.5～30 kV
照射電流	0.1 pA～2 nA
倍率	25～650000 倍
像分解能	1.0nm (15kV)、2.2nm (1kV)
試料サイズ	最大直径 2 インチ
EDS 検出範囲	0～20 keV
検出可能元素	B～U
エネルギー分解能	133 eV 以下

特徴

- 大型試料に対応し、微細構造の高分解能観察が可能な、電界放射走査電子顕微鏡（FE-SEM）。
- 二次電子像の他、組成コントラストを持つ反射電子像が観察可能。
- エネルギー分散型 X 線分析装置（EDS）により、含有元素の定性・定量分析、マッピングが可能。

設備紹介（集束イオンビーム加工装置(FIB)/JEM-9310FIB（P））ナノプラット　担当）中尾　聡



メーカー：JEOL
型　　式：JEM-9310FIB (P)
導入年度：平成 14 年度
（主な仕様）

イオン源	Ga 液体金属イオン源
加速電圧	0.5～30 kV
イオン電流	1 pA～10 nA（10 段階切替）
加工形状	矩形、直線、点
デポジション	カーボン化合物
試料サイズ	最大 20mm 角

特徴

- Ga イオンビームを集束し、指定した微小領域（通常は数μm～数十μm）を走査させることによって、局所的なエッチング加工を行なうことが可能。
- 加工形状は、矩形、直線、点の 3 種類で、複雑な形状の加工には非対応。
- 特定の化合物ガスを試料表面に吹き付けながら走査すると、その領域に薄膜がデポジションされる。本装置ではカーボンのみ対応。
- 主として、TEM 観察用薄膜試料、断面 SEM 観察用試料の作製に用いる。

熱分析装置

概要

熱分析とは、物質の温度を一定のプログラムによって変化させながら、その物質のある物理的性質を温度の関数として測定する分析法である。

熱流差を検出する示差走査熱量測定(DSC)による融解・結晶化や比熱の測定、質量（重量変化）を検出する熱重量測定(TGA)による脱水・熱分解の測定などがある。

設備紹介（VP-DSC）　担当）中野　路子

メーカー：MicroCal
型　　式：VP-DSC
導入年度：平成 21 年度
（主な仕様）

温度範囲	-10〜130 ℃
セル容量	500 μl
スキャン速度	upscan mode: 0〜90 ℃/hr downscan mode: 0〜-60 ℃/hr
付属品	ThermoVac
システム	OS:WindowsXP Software：VPViewer 2000 VP-DSC ver.1.04.0027、 ORIGIN ver.7.10(analysis)

特徴

- 温度変化による試料の転移または変性の熱変化を測定できる。

設備紹介（iTC_{200}）　担当）中野　路子

メーカー：MicroCal
型　　式：iTC_{200}
導入年度：平成 21 年度

（主な仕様）

温度範囲	2〜80 ℃
セル容量	200 μl
滴定シリンジ	volume　：40 μl Stirring Rate: 500-1500 rpm
システム	OS:WindowsXP Software：iTC200 ver.1.24.0.2、 ORIGIN ver.7.10(analysis)

特徴

- 一定温度下で、リガンド滴下によって生じる相互作用の熱変化を測定できる。

6. 所有設備紹介

設備紹介（TGA2950、SDT2960、DSC2920）　担当）藤原　基靖

メーカー：TA Instruments

型　　式：TGA2950
導入年度：平成７年度
（主な仕様）

温度範囲	RT～1000 ℃
重量範囲	0.1 μg～100 mg
サンプルパン	100 μl（プラチナ）
昇温速度	0.1～100 ℃/min

特徴

- 重量変化に応じて昇温速度を変化させる高分解能測定が可能。

メーカー：TA Instruments

型　　式：SDT2960
導入年度：平成７年度
（主な仕様）

温度範囲	RT～1500 ℃
サンプルパン	90 μl（アルミナ）
昇温速度	0.1～100℃/min（～1000℃） 0.1～25℃/min（～1500℃）

特徴

- TGA と DTA の同時測定が可能。

メーカー：TA Instruments
型　　式：DSC2920
導入年度：平成７年度

（主な仕様）

温度範囲	-130～600 ℃
サンプルパン	ノンハーメチック、ハーメチック（アルミニウム）
システム（TGA、SDT、DSC 共通）	OS:WindowsXP（更新） 制御：Thermal Advantage 解析：Universal Analysis

特徴

- モジュレーティッド DSC により、可逆的成分と非可逆成分の分離が可能。
- 液体窒素冷却システムにより低温測定が可能。

マトリックス支援レーザー脱離イオン化-飛行時間型質量分析計（MALDI-TOF-MS）

概要

イオン化部はマトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI）、質量分離部が飛行時間型の質量分析計（TOF-MS）。MALDIはマトリックスと呼ばれるイオン化を促進する試薬を試料と共にサンプルプレート上に結晶化させ、そこにレーザー光を照射する。マトリックスはレーザー波長に対して吸収を持っているので急速に加熱され試料と共に気化される。試料は気相反応（プロトン移動など）によってイオン化し、TOF-MSと呼ばれるイオン源で発生したイオンがフライトチューブ内を飛行し検出器まで到達する時間によって質量を測定する装置により分離、検出される。MALDIによるイオン化は穏和で試料分子の分解が起こりにくく、TOF-MSは分子量が数万〜十数万のタンパク質のような高分子を測定することが可能であり、発生したイオンの大部分が検出器に到達するため感度も高い点が挙げられる。

設備紹介（Voyager DE-STR）　担当）牧田　誠二

メーカー：Applied Biosystems
型　　式：Voyager DE-STR
導入年度：平成11年度
（主な仕様）

Mass range	≧300000Da
Linear mode Resolution	≧80（BSA） ≧1000（Myoglobin） ≧3000（Angiotensin Ⅰ） ≧3500（ACTH 18-39）
Reflector mode Resolution	≧15000（bovine insulin） ≧1200（E.coli Thioredoxin） ≧7000（Angiotensin Ⅰ） ≧10000（ACTH Clips）

Linear mode Mass accuracy	0.05% （External Calibration） 0.02% （Internal Calibration）
Reflector mode Mass accuracy	0.008% （External Calibration） 0.001% （Internal Calibration）

特徴

測定には感度、分解能が異なるLinear modeとReflector modeの2種類がある。

Linear modeによる測定は一般的に高感度、低分解能であり、Reflector modeはフライトチューブ内でイオンを反転させることによって、初期運動エネルギーの広がりを収束させる効果と飛行距離を伸ばす効果により高分解能を実現している。しかし、感度の点においてはLinear modeより低下する。測定の際には、初めにLinear modeで目的のピークの有無を確認した後、分解能が不足している場合には更にReflector modeでの測定をすることを薦めたい。また、Reflector modeによるmass rangeは約10000Da程度になるので注意が必要である。

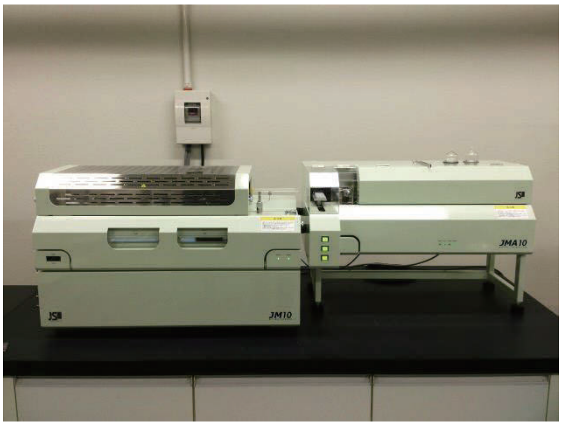
有機微量元素分析装置

概要

試料をPregl–Dumas法に基づいて熱分解し、有機物を構成する主要元素である水素、炭素、窒素を定量的に水、二酸化炭素、窒素に変換し、これらを熱伝導法によって検出する。実際の分析では水素、炭素、窒素の含有率が既知の標準試料を分析し、その検出感度から未知試料の含有率を決定する。

（品質管理分析）（石油、石炭、コークスなどの燃料分析）（土壌、ヘドロの分析）（水中の浮遊物質および底質の分析）（大気汚染など公害測定）（無機物の分析）等の用途が挙げられる。

設備紹介（MICRO CORDER JM10）　担当）牧田　誠二



メーカー：J-SCIENCE LAB
型　　式：MICRO CORDER JM10
導入年度：平成23年度
（主な仕様）

測定元素	水素、炭素、窒素
測定精度	絶対誤差　±0.3％以内
測定範囲	水素　0.5～400μg 炭素　3～2600μg 窒素　1～1000μg

特徴

依頼分析を以下のように行っている。

(1)1試料につき10mg程度を採取しやすいサンプル管に入れて下さい。

【補足】通常、1回の測定につき2mg程度使用します。試料によっては確認のため数回測定する場合があるので、充分な量として10mgとしてありますが、用意できる範囲の試料量でも構いません。

(2)サンプル管には試料名を明記して下さい。

(3)元素分析依頼書に必要事項を記入の上、メールに添付し元素分析担当者まで送信して下さい。

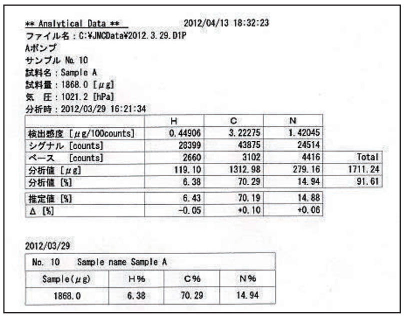
（牧田：E-mail:makita@ims.ac.jp）

(4)測定日をメールにてお知らせしますので指定された日に試料を山手4号館4F404号室入口にある箱に入れて下さい。

(5)測定終了後にメールにてお知らせしますので測定結果、残余試料を回収して下さい。

測定例

未知試料の測定結果を図1に記載する。


** Analytical Data **　2012/04/13 18:32:23
ファイル名：C:¥JMCData¥2012.3.29.D1P
Aポンプ
サンプル No. 10
試料名：Sample A
試料量：1868.0 [μg]
気　圧：1021.2 [hPa]
分析時：2012/03/29 16:21:34

	H	C	N	
検出感度 [μg/100counts]	0.44906	3.22275	1.42045	
シグナル [counts]	28399	43875	24514	
ベース [counts]	2660	3102	4416	Total
分析値 [μg]	119.10	1312.98	279.16	1711.24
分析値 [%]	6.38	70.29	14.94	91.61
推定値 [%]	6.43	70.19	14.88	
Δ [%]	−0.05	+0.10	+0.06	

2012/03/29

No. 10　Sample name Sample A			
Sample(μg)	H%	C%	N%
1868.0	6.38	70.29	14.94

図1　未知試料の測定結果

備考

所外公開はせず、所内専用で運用している。

蛍光 X 線分析装置

概要

物質にX線を照射すると、物質を構成する元素固有のエネルギー（波長）を持つ蛍光X線（特性X線）が発生する。この蛍光X線のエネルギーを測定することにより、測定物質を構成する元素の分析（定性分析）を行うことができ、またそのエネルギーのX線強度から目的元素の濃度を求める（定量分析）ことができる。蛍光X線分析装置とは、対象となる試料にX線を照射し、そこから発生する蛍光X線のエネルギーを測定することで、試料を構成する元素の種類や濃度を判断するために用いる装置である。この装置の大きな特徴として、対象試料の範囲が広く、固体・液体・粉末など種々の形態で測定が可能であること、非破壊分析であること、測定作業が簡便で短時間で分析を行えることが挙げられる。

応用範囲は多岐にわたり、金属、鉱物の組成分析の他、食品分析や土壌分析、環境分析でも利用されている。

設備紹介（JSX-3400RⅡ）　担当）上田　正

メーカー：JEOL
型　　式：JSX-3400RⅡ
導入年度：平成 20 年度
（主な仕様）

検出元素範囲	Na - U
X 線発生装置	5 - 50 kV, 1 mA, 50 W
ターゲット	Rh
フィルタ	4種自動交換（オープン含む）
コリメータ	1 mmϕ/ 3 mmϕ/ 7 mmϕ
検出器	Si（Li）半導体検出器
試料室サイズ	300 mm（ϕ）× 150 mm（H）
試料室雰囲気	大気または真空

特徴

CCD カメラ（38 万画素、10.8 mm×8.2 mm）で観察しながら試料の分析位置を調整でき、そのデータは測定データと一緒に保存できる。

また、WEEE 指令、RoHS 指令、ELV 指令、日本の土壌汚染対策法などの有害物質規制に対応している。極微量の Cd、Pb、Hg、Cr などの有害元素の測定が簡単にでき、分析結果報告書作成ソフトによって、報告書が容易に作成可能。

測定方法

固体試料は X 線照射位置に載せるだけで分析可能。試料が粉末や液体の場合は専用のセルに試料を満たすことで分析ができる。ただし、セル表面には高分子フィルムが貼られており、軽元素の X 線が吸収されてしまうため、軽元素の感度は低下する。粉末試料の場合は加圧整形器でペレットを作製してもよい。

備考

装置の故障、検出器の性能劣化の恐れがあるので、液体試料の測定をする際、真空排気は行わないこと。

核磁気共鳴（NMR）装置

概要

核磁気共鳴（NMR）とは磁気モーメントをもつ原子核を含む物質を磁場の中におき、これに共鳴条件を満足する周波数の電磁波を加えたときにおこる共鳴現象である。核磁気共鳴装置はこの共鳴現象を観測することによって、原子の化学的環境を反映した原子個々の情報（どの原子とどの原子が隣り合っているか、原子間の距離がどの程度かなど）が得られるので、化合物の分子構造や組成、物理化学的性質を分析する方法として様々な分野で日常的に用いられる。

設備紹介（JNM-ECA920）　ナノプラット　担当）中野　路子

メーカー：JEOL
型　　式：JNM-ECA920
導入年度：平成 16 年度
（主な仕様）

磁場	21.6 T
感度（S/N）	Liquid：^{1}H＝2500 Solid：^{13}C＝600
プローブ	Liquid：HCNFG3、CHFG3 Solid：4mm−13C−CPMAS 、4mm−13C−CPMAS 温度可変、4mm−15N−CPMAS、4mm−MQMAS

システム	OS：Red Hat Linux7.3、 Mac OS10.4 Software：Delta4.3.4

特徴

- 溶液の HCN 三重共鳴測定が可能
- 固体測定が可能
- 長時間低温測定ユニットによる 0℃までの低温測定が可能
- 測定操作は担当職員が行う
- １回あたりの予約は最長１週間まで

備考

文部科学省・ナノサイエンス支援プロジェクトによって平成16年に分子科学研究所に導入された、^{1}Hの共鳴周波数920MHzという超高磁場のNMR装置である。平成24年7月からはナノテクノロジープラットフォームプロジェクトによって運営されており、共同利用装置として大学から民間企業まで広く公開している。固体の温度可変測定もできるようになったので、生体試料の固体測定にもぜひ利用していただきたい。詳細はHPで紹介しているので、参考にしていただきたい。
http://nano.ims.ac.jp/ims_920nmr/920nmr.html

設備紹介（AVANCE800）　ナノプラット　担当）山口　拓実

メーカー：Bruker
型　　式：AVANCE800
導入年度：平成 25 年度

（主な仕様）

磁場	18.79 T
感度（S/N）	^{1}H＝8800、^{13}C＝1900
プローブ	H-C-N 三重共鳴 TCI 型クライオプローブ
システム	OS：CentOS 5 Software：TopSpin2.1

特徴

- 溶液の HCN 三重共鳴測定が可能
- 極低温プローブによる超高感度計測に対応

備考

TCI型クライオプローブは低温下に保たれた ^{1}Hおよび^{13}Cプリアンプを搭載し、^{1}H、^{13}Cの高感度測定に最適化されている。

設備紹介（AVANCE600）　ナノプラット　担当）西村　勝之

メーカー：Bruker
型　　式：AVANCE600
導入年度：平成 25 年度

（主な仕様）

磁場	14.1 T
感度（S/N）	Liquid：^{1}H≧1028
プローブ	Liquid：5 mm H-C-N 三重共鳴 TXI 型 Solid：2.5 mm H-C-N 三重共鳴 CPMAS
システム	OS：CentOS 5 Software：TopSpin2.1

特徴

- 溶液の HCN 三重共鳴測定が可能（核種固定）
- 固体の HCN 三重共鳴測定が可能（核種固定）
- 固体の試料体積 15μl
- 固体 MAS 最高回転周波数 35kHz
- 長時間低温測定ユニットによる長時間低温測定が可能　溶液：−50℃、固体：−30℃

６．所有設備紹介

設備紹介（JNM-ECA600）　担当）中野　路子

プローブ	Liquid：Royal、HCNFG3 Solid：4mm-CPMAS
システム	OS：Windows7 、 Software：Delta5.0.3

特徴

- 固体測定が可能
- 溶液の各種多核測定が可能
- 溶液の HCN 三重共鳴測定が可能
- 長時間低温測定ユニットによる長時間低温測定（-20℃まで）が可能
- 液体窒素 30L 容器を用いた-100℃までの低温測定が可能
- 予約は時間単位で、長時間測定優先

メーカー：JEOL
型　　式：JNM-ECA600
導入年度：平成 21 年度（平成 22 年度システム・ソフトウェア更新）

（主な仕様）

磁場	14.1 T
感度（S/N）	Liquid（Royal）：^{1}H≧850、^{13}C≧330 Solid：^{13}C≧280

設備紹介（JNM-Lambda500）　担当）中野　路子

（主な仕様）

磁場	11.7 T
感度（S/N）	^{1}H≧250、^{13}C≧150
プローブ	TH5AT、H5XFG2、C5FH、10TL
システム	OS：WindowsXP 、 Software：winLambda ver2.0

特徴

- 溶液の各種多核測定が可能
- ^{1}H/^{19}F の同時照射が可能
- 液体窒素 30L 容器を用いた-100℃までの低温測定が可能
- 予約は 15 分単位

メーカー：JEOL
型　　式：JNM-Lambda500
導入年度：平成 7 年度

設備紹介（JNM-ECS400）　担当）中野　路子

メーカー：JEOL
型　　式：JNM-ECS400
導入年度：平成 23 年度

（主な仕様）

磁場	9.4 T
感度（S/N）	^{1}H≧280、^{13}C≧190
プローブ	TH5AT/FG
システム	OS：Windows7 、 Software：Delta5.0.3

特徴

- 溶液の各種多核測定が可能
- 液体窒素 10L 容器を用いた-100℃までの低温測定が可能
- 予約は 15 分単位

備考

所外公開はしていません。

表 1　所有プローブ一覧

装置	プローブ	観測核	照射核	温度範囲	Auto Tune
ECA920	5 mm HCN/FG	^{1}H	^{13}C,^{15}N	0～+60℃	×
	5 mm CH/FG	^{13}C	^{1}H	0～+60℃	×
	4 mm 13C-CPMAS	^{13}C	^{1}H	×	×
	4 mm 13C-CPMAS 温度可変	^{13}C	^{1}H	0～+50℃	×
	4 mm 15N-CPMAS	^{13}C	^{1}H	×	×
	4 mm M ﾚﾝｼﾞ MQMAS	^{23}Na～^{35}Cl	—	×	×
AVANCE800	5 mm H-C-N TCI 型 cryo	^{1}H	^{13}C,^{15}N	+5～+75℃	○
AVANCE600	5 mm H-C-N TXI 型	^{1}H	^{13}C,^{15}N	-50～+80℃	○
	2.5 mm H-C-N CPMAS	^{1}H,^{13}C,^{15}N	^{1}H,^{13}C,^{15}N	-30～+80℃	×
ECA600	5 mm Royal	^{1}H	^{15}N～^{31}P	-100～+150℃	○
	5 mm HCNFG3	^{1}H	^{13}C,^{15}N	-20～+100℃	×
	4 mm CPMAS	^{15}N～^{31}P	^{1}H	室温～+80℃	×
Lambda500	5 mm TH5AT	^{15}N～^{31}P	^{1}H or ^{19}F	-100～+150℃	○
	5 mm H5XFG2	^{1}H	^{15}N～^{31}P	-100～+150℃	×
	5 mm C5FH	^{13}C	^{1}H,^{19}F	-100～+150℃	×
	10 mm 10TL	^{103}Rh～^{15}N	^{1}H or ^{19}F	-50～+120℃	×
ECS400	5 mm TH5AT/FG	^{15}N～^{31}P	^{1}H or ^{19}F	-100～+150℃	○

（装置やプローブの選択について、不明な点がありましたらご相談ください。）

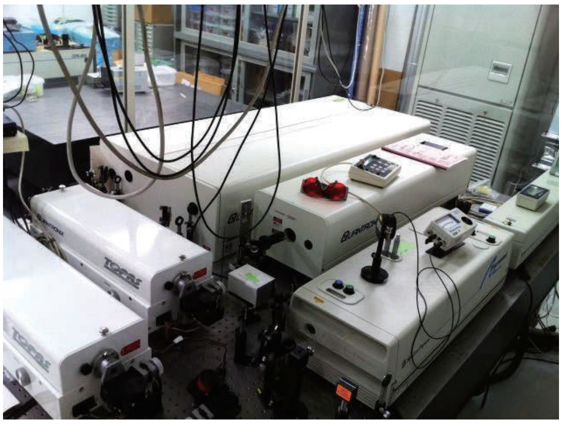
ピコ秒レーザー

概要

超短パルスレーザーでは、不確定性原理によってパルスの時間幅と波長幅（バンド幅）を同時に狭くすることは相反するが、ピコ秒のレーザーはその両者、つまり時間分解能とエネルギー分解能の両方において高い分解能が得られるとされている。そのためピコ秒レーザーは、物理化学分光研究における超高速時間分解実験の分光用光源として用いられ、超高速時間分解吸収、或いは蛍光スペクトルを高い分解能で観測するための最も重要なツールである。

また、ピコ秒レーザーは、パルス幅が短くピークパワーが高いため、熱影響の少ない精密微細加工を実現できるツールとしても応用されている。

設備紹介（Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS）　担当）上田　正



メーカー：Spectra-Physics,Quantronix
型　　式：Millennia-Tsunami,TITAN-TOPAS
導入年度：平成10年度
（主な仕様）

波長 (Main Curve)	490～800 nm at TOPAS 400 1180～1700 nm at TOPAS 800
パルスエネルギー	＞ 80 mW at 550 nm (S+I) ＞ 100 mW at 1300 nm (S+I) (RGA 1.7 W at 790 nm) (Pump (YLF) 13 W)
パルス幅	＜ 5 ps
繰り返し	1 kHz

特徴

本システムは、紫外光から赤外光の広範囲に渡って、波長を任意に出力できる。また、紫外光と赤外光の2波長を同時に出力できるため、ポンプ・プローブ実験にも適用できる。

測定方法

• 装置の構成

本システムは、図1に示すようにすべて固体レーザーで構成されている。CW 半導体レーザーを励起光源としたモードロック Ti:Sapphire レーザーの出力光をシード光として、ポンプ光には Q-Switch Nd:YLF レーザーを用い、チタンサファイア再生増幅器からピコ秒赤外光（790 nm）を発振させている。この再生増幅器の出力を2つに分け、一方（約 1.08 mJ）で2倍波（395 nm）を発振させ紫外光用 OPA（TOPAS 400: Travelling - wave Optical Parametric Amplifier of Superfluorescence 400）を励起し、残りのもう一方（約 0.57 mJ）で赤外光用 OPA（TOPAS 800）を励起し、チューナブルな紫外光、及び赤外光を発振させている。

• レーザー出力

(1)　発振波長：得られる波長を表 1 に示す。TOPAS 800 からシグナル光、アイドラ光が得られ、外付けの BBO Crystal を取り替える

ことでそれぞれの２倍波発生（SHS,SHI）や、ポンプ光（790 nm）とシグナル光、或いはアイドラ光との和周波発生（SFS,SFI）、シグナル光、アイドラ光それぞれの４倍波発生（FHS,FHI）、さらにはシグナル光とアイドラ光との差周波発生（DFG）によって、紫外光から赤外光のレーザー光を得ることができる。また、TOPAS 400 からも同様にシグナル光、アイドラ光、それぞれの２倍波発生を得ることができる。希望する波長は、パソコンにその値を入力することで、簡単に出力することができる。

(2)　出力値：図２に、TOPAS 400 と TOPAS 800 のパワースペクトル（メインカーブのみ）を示す。

(3)　パルス幅（時間分解能）：図１に示すように、オプティカルディレイステージを利用した自己相関法で測定した。その結果、およそ２ ps（図３）であった。

表１　発振波長（nm）

TOPAS 800	TOPAS 400
Signal 1180 ～ 1700	Signal 490 ～ 800
Idler 2385 ～ 1475	Idler 2030 ～ 780
SHS 590 ～ 850	SHS 300 ～ 400
SHI 1180 ～ 740	SHS 245 ～ 355
SFS 474 ～ 538	SHI 510 ～ 395
SFI 593 ～ 515	
FHS 295 ～ 425	
FHI 500 ～ 370	
DFG 2400 ～10500	

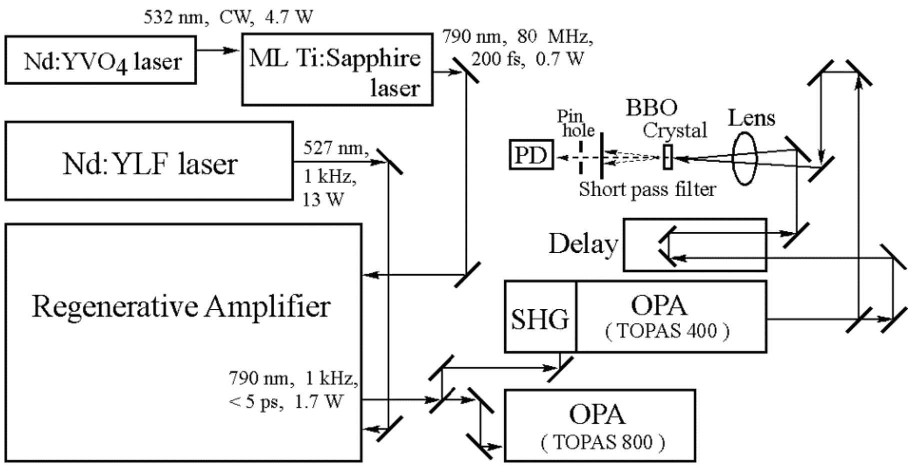


図１　ブロック図

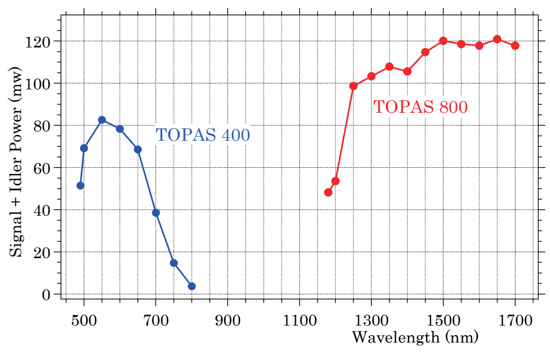


図２　パワースペクトル（メインカーブのみ）

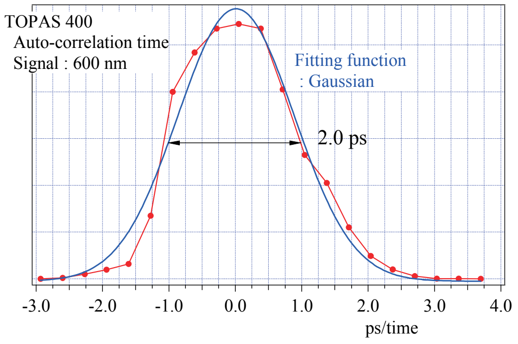


図３　パルス幅の測定

ナノ秒レーザー

概要

ナノ秒レーザーとは、時間幅が数ナノ秒から数十ナノ秒の光パルスを発生させることができるレーザー装置で、エキシマーレーザーやパルスNd:YAGレーザー及び、それらを励起レーザーとする波長可変レーザーの総称である。

エキシマーレーザーは、アルゴン、クリプトン、キセノンなどの希ガスと、フッ素、塩素などのハロゲンの混合ガスを用いてレーザー光を発生させる装置である。Nd:YAGレーザーは、1064nmを発生させる固体レーザー装置であるが、本センターでは波長可変レーザー装置の励起光源として用いるために、２倍波あるいは３倍波を発生させている。エキシマーレーザー及びNd:YAGレーザーは共に非常に強い紫外領域のレーザー光が得られる装置である。

分子科学の実験では、さまざまな分子の光吸収領域等に応じて、あらゆる光領域のレーザー光が求められる。色素レーザーは、蛍光を発する色素溶液をレーザー媒体とするレーザー装置で、実験に求められる発振波長に応じて色素溶液の種類を選択することによって紫外から近赤外の広い波長範囲にわたってレーザー光を発生させることができる。ＯＰＯレーザーは、色素レーザーの色素に代わって、非線形結晶で起きるパラメトリック増幅を応用したレーザーである。本センターのＯＰＯレーザーは、発振器に色素レーザーを用い、発生したレーザー光を光パラメトリック増幅することによって、Signal光とIdler光を得ている。色素レーザー及びＯＰＯレーザー共に、安定した光パルス特性、高い波長分解能及び広い波長可変性などの特性を利用して様々な分光実験や光化学反応などの励起光源として利用されている。

設備紹介（エキシマー励起色素レーザー /Compex Pro 110, LPD3002）　担当）山中　孝弥

メーカー：Coherent, Lambda Physik
型　　式：Compex Pro 110, LPD3002
導入年度：平成20年度, 平成4年度

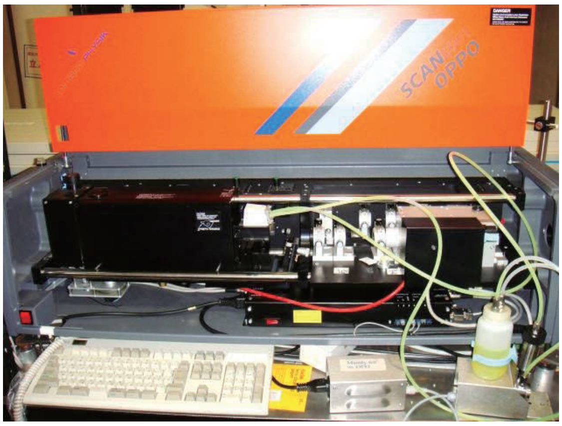
（主な仕様）

波長範囲	基本波 320 – 970 nm ２倍波 260 – 348 nm
パルスエネルギー	10mJ/pulse at 580 nm 1mJ/pulse at 290 nm
波長分解能	0.2 cm^{-1}
パルス幅	～10 ns
発振繰り返し	単発～50 Hz

測定例

超音速ジェット中における多環芳香族化合物などの高分解能分光や微弱光分光などの励起光源に用いられている。

設備紹介（Nd:YAG 励起 OPO レーザー /GCR-250, Scanmate OPPO）　担当）山中　孝弥



メーカー：Spectra-Physics, Lambda Physik
型　　式：GCR-250, Scanmate OPPO
導入年度：平成 7 年度

（主な仕様）

波長範囲	Signal 426 – 710 nm Idler　710 – 2135 nm
パルスエネルギー	10mJ/pulse at 580 nm
波長分解能	0.15 cm^{-1}
パルス幅	～12 ns
発振繰り返し	10 Hz

測定例

　気相あるいは凝縮相などの過渡吸収、蛍光減衰曲線及び時間分解蛍光スペクトルなどの測定における励起光源に用いられている。エキシマ励起色素レーザーと組み合わせた同期励起が可能であり、2 波長分光等にも応用されている。

設備紹介（フッ素系エキシマーレーザー /Compex 110F）　担当）山中　孝弥

メーカー：Lambda Physik
型　　式：Compex 110F
導入年度：平成 7 年度

（主な仕様）

発振繰り返し	単発～100Hz
発振波長（パルスエネルギー）	193 nm (200mJ/pulse)
	248 nm (400mJ/pulse)
	351 nm (150mJ/pulse)

測定例

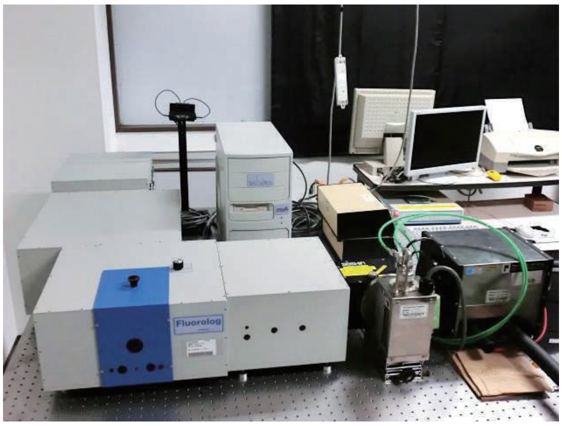
　光化学反応や光イオン化などの励起光源に用いられている。

蛍光分光光度計

概要

蛍光分光光度計は、励起光を試料に当て、放出される蛍光強度やスペクトルを測定して物質の定量、定性分析を行う装置で、吸光分析である分光光度計よりも非常に高い感度で測定が可能である。観測側（蛍光側）の分光器の波長を蛍光波長に固定し、励起側の分光器の波長をスキャンすると励起スペクトルが得られる。励起側の波長を固定（最も強い蛍光を生じる励起波長）し、観測側の分光器の波長をスキャンすると蛍光スペクトルが得られる。また、励起側分光器と観測側分光器の両方の波長をスキャンさせて測定できる装置もあり、簡単に蛍光励起スペクトルの測定が可能である。

設備紹介（SPEX Fluorolog 3-21）　担当）上田　正



メーカー：HORIBA
型　　式：SPEX Fluorolog 3-21
導入年度：平成8年度(平成21年度更新)
（主な仕様）

波長範囲	250 nm ～ 1500 nm
波長精度	±0.5 nm
検出方式	フォトンカウンティング検出
励起光分光器	ダブルモノクロ分光器
信号対雑音比率	4000：1
光電子増倍管	紫外可視用：R928（電子冷却） 近赤外用：R5509-73（液体窒素冷却）
光源	450 W　Xe ランプ
スキャンスピード	最大 150 nm/sec
その他	リファレンス検出器有

特徴

- 米国のSPEX社製モジュール方式で、光源部、励起側分光器、試料室、観測側分光器、光検出部、制御部から構成されている。本装置の光学系概略図を図1に示す。

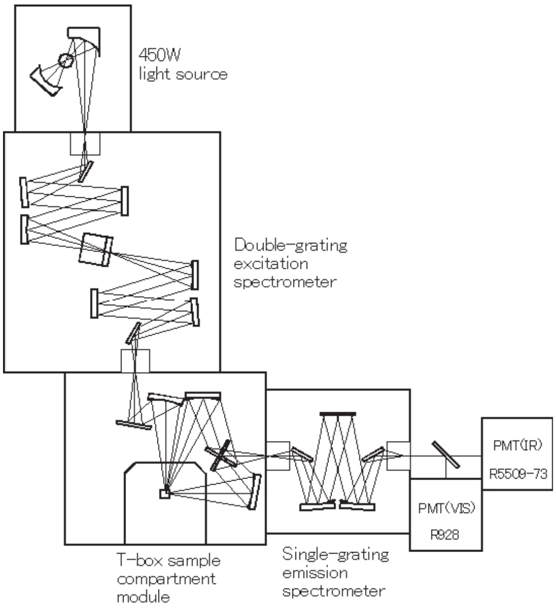


図1　光学系概略図

- フォトンカウンティング検出によって、超微弱蛍光測定が可能である。

- 近赤外（～1500 nm）の領域まで測定できる光電子増倍管も備えており、紫外可視用検出器との切換機構は本装置独自のもので、ワンタッチで切り換えることが可能である。
- 励起側はダブルグレーティング分光器となっており低迷光を実現している。
- 高速スキャンによって測定時間が短縮でき、時間とともに劣化する試料についても、より信頼性の高いデータが得られる。
- 装置の制御やデータ収集は、科学分野で広く利用されている「Origin」ベースのソフトウェア「FluorEssence」によって、操作が簡単便利になっており、蛍光励起スペクトル測定（3D マトリックススキャン）も容易である。

測定例

(1)　水のラマンスペクトル

蛍光分光光度計の感度の評価方法として、水のラマンスペクトルのS/N 比（信号対雑音比率）の値が用いられ、

$$\frac{\text{ピークシグナル値}-\text{バックグランド値}}{\sqrt{\text{バックグランド値}}}$$

で定義されている。バックグランド値とはラマン光シグナルが現われない波長 450 nm の時の値である。測定結果を図 2 に示す。

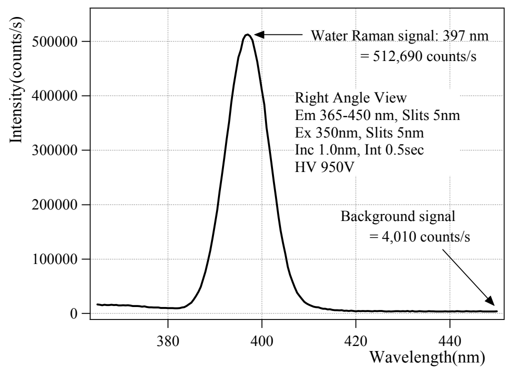


図２　水のラマンスペクトル

グラフから、S/N 比 8033:1 となった。

$$\frac{512,690-4010}{\sqrt{4010}}=8033$$

(2)　近赤外 － 蛍光励起スペクトル（3D マトリックススキャン）

レーザー媒質としてよく知られる Nd:YAG の結晶（$Y_{3-x}Nd_xAl_5O_{12}$）を用いて、3D マトリックススキャン測定を行った。この結晶は、730 nm と 800 nm 付近の光を吸収して基底状態から高いエネルギー準位に遷移し、その後速い無放射遷移を経て 1064 nm でレーザー発振が起こる。励起波長を 700 nm ～ 900nm、蛍光波長を 1000 nm ～ 1100 nm として自動測定した結果を図 3 に示す。3D 表示によって、励起波長に対する蛍光ピーク波長が 1064 nm であることがよく分かる。なお、高速スキャン化によって、測定時間は約 1 時間（Increment: 2 nm）であった。

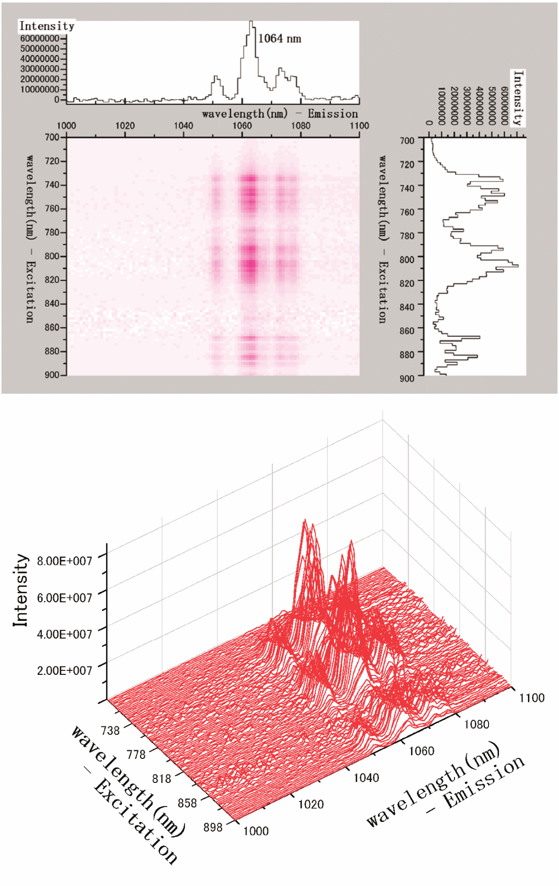


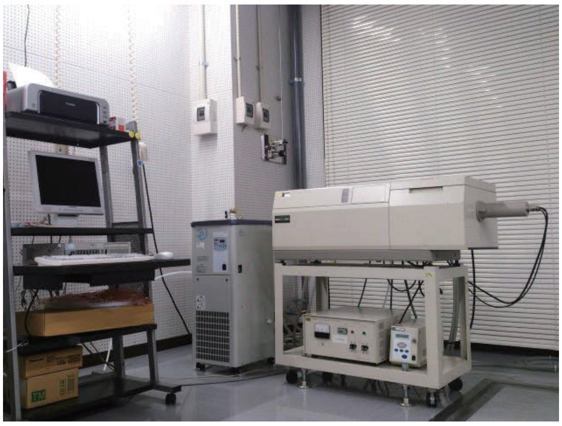
図３　蛍光励起スペクトル

円二色性分散計

概要

円二色性分散計は光学活性分子の立体構造（相対～絶対配置、立体配座、生体高分子の高次構造）を解析する手段として利用される。分光器から出た光は偏光子で直線偏光にされ、円偏光変調器で左右円偏光が交互に作られ試料を通過する。この時、試料が光学活性物質であると円偏光の不等吸収が起こり（この現象を円二色性または CD と呼ぶ）、その左右円偏光の差吸光度⊿A（通常は楕円率 θ で表される）が観測される。楕円率とは直線偏光を光学活性物質の吸収波長で通過させると楕円偏光になるが、その楕円の短軸長軸の正接角 θ をもって定義され、⊿A が小さいと θ=33×⊿A が成り立つ。CD 測定でのフルスケールは θ 表示（単位 mdeg）である。

設備紹介（J-720WI）　担当）牧田　誠二



メーカー：JASCO
型　　式：J-720WI
導入年度：平成 7 年度
（主な仕様）

光源	450W Xe ランプ水冷方式
検出器	ヘッドオン型光電子増倍管
変調器	ピエゾエラスティックモデュレータ
測定波長範囲	165～1100nm
波長正確さ	165～180nm　±0.2nm 180～250nm　±0.1nm 250～500nm　±0.3nm 500～800nm　±0.8nm 800～1100nm　±2.0nm

バンド幅	0.1～10nm
スリット幅	1～3000μm
レスポンス	0.5msec～16sec
走査速度	1～5000nm/min
フルスケール	±200mdeg（感度100mdegの時） ±2000mdeg（感度1000mdegの時）
縦軸分解能	0.01mdeg（感度 100mdeg の時） 0.1mdeg（感度 1000mdeg の時）
RMS ノイズ	185nm　0.05mdeg 200nm　0.04mdeg 500nm　0.035mdeg
ベースライン安定性	0.2mdeg/hr
UV 測定	シングルビーム測定 測光レンジ 0～5Abs 測光正確さ±0.01Abs

特徴

以下の付属品を所有している。

- ペルチェ式恒温装置
- 温度コントローラー
- タンパク質二次構造解析プログラム
- クライオスタット
- MCD

可視紫外分光光度計

概要

可視紫外分光光度計は、測定する物質が可視紫外領域の光に対してどの程度その光を吸収するかを波長分布として測定する装置である。実際は、透過率を測定しソフトウエアで計算によって吸光度を求めており、物質の同定や性質、あるいは濃度（定量分析）を調べることができる。付属装置によって、半導体・薄膜・ガラスやフィルムなどの固体試料の反射率・透過率測定ができる装置もある。

設備紹介（U-3500）　担当）上田　正

メーカー：Hitachi
型　　式：U-3500
導入年度：平成8年度（平成18年ソフトウエア更新）
（主な仕様）

波長範囲	200 nm ～ 3200 nm
分光器	プリズム・回折格子型ダブルモノクロメータ
検出器	光電子増倍管 R-928（紫外可視域） 冷却型 Pbs（近赤外域）
波長設定繰返し精度	±0.1 nm（紫外可視域） ±0.5 nm（近赤外域）
測定モード	吸光度、透過率、反射率、リファレンス側エネルギー、サンプル側エネルギー
ベースライン平坦度	＜±0.002 Abs:240～850nm（スリット 6nm） ＜±0.004 Abs:850～2200nm（スリット自動） ＜±0.008 Abs:220～2600nm］（スリット自動）

特徴

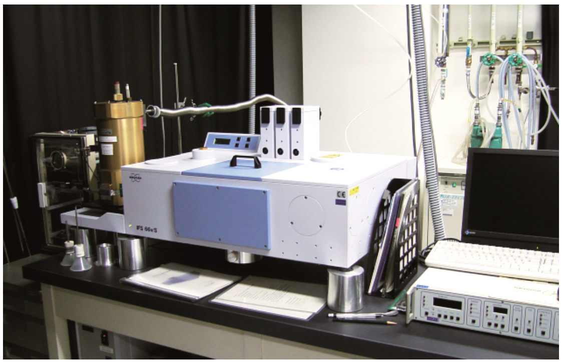
- 測定波長領域が広い。
- 光源にヨウ素タングステンランプ（可視域）と重水素ランプ（紫外域）を使用し、測定波長に応じて自動切り換え。
- 分光器をシリーズに結合したダブルモノクロメータとなっているため、超低迷光で高い吸光度まで測定が可能。
- 分光された単色光は、回転ミラーによって対照側と試料側とに分岐して試料室に導かれるダブルビーム方式となっているため、高精度測定を迅速に行うことが可能で、経時変化や温度変化に伴う吸光度変化を測定する場合にも有用。
- 冷却形の近赤外検知器の採用によって、測定感度が良好。
- 付属装置として、固体試料（ガラスフィルターやフィルム）測定用ホルダー、5 度正反射率測定用ホルダー、電子冷熱式恒温セルホルダー等も装備。

フーリエ変換赤外(FTIR)分光光度計

概要

分子や固体結晶を構成する原子は化学結合の状態を反映した振動数で振動している。その固有振動数は経験則や量子化学計算により体系的に理解されており、赤外領域に現れるこれらの共鳴吸収を調べることで物質の局所構造を詳しく解析することができる。主な用途として、単分子膜等における微弱な赤外信号の観測や、金属配位結合やイオン結合、分子全体の集団運動等の低波数振動、結晶の格子フォノン等の解析が挙げられる。

設備紹介（IFS 66v/S）　ナノプラット　担当）賣市　幹大



メーカー：Bruker
型　　式：IFS 66v/S
導入年度：平成 16 年
（主な仕様）

Beam Splitter	波長領域（cm^{-1}）
Far-IR Mylar	20 – 500
KBr	375 – 7000
CaF_2	2800 – 12000
Quartz	2800 – 12000
検出器	検出領域（cm^{-1}）
DTGS	10 – 700
MCT	420 – 8000
Bolometer	>5
光源	波長領域
Mercury	遠赤外
Globar	中赤外

特徴

本装置は検出感度と波長安定性に優れた研究用フーリエ変換赤外分光器（FT-IR）であり、光学系全体を真空排気できる筐体の採用により、汎用装置では検出困難な遠赤外領域の信号を含めた広い波長領域のスペクトルを最高の精度で測定することが可能である。

測定方法

固体試料測定のため KBr 錠剤形成装置（真空排気ペレットダイス、ϕ13 mm ダイス、真空ポンプ、10 ton 油圧プレス）を用意している。波長範囲 250 cm^{-1} 以上の測定に活用できる（推奨圧力 8 ton 以上）。液体セル、ATR 光学系等はメーカーオプションで、使用者個人で準備が必要である。

参考データ

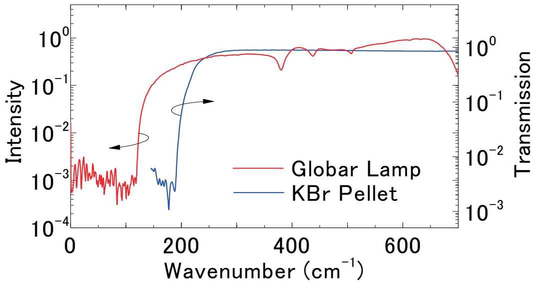


図　Globar 光源の放射強度と KBr ペレットの透過スペクトル

顕微ラマン分光装置

概要

ラマン分光は赤外分光と共に最も広く応用されている振動分光法である。２光子過程であるラマン散乱は１光子過程の赤外吸収と光学的な選択律が異なっており赤外吸収と相補的な情報を与えることから両者は併用されることも多い。ラマン信号は通常微弱だが励起光が中間状態と共鳴するときに顕著な増幅をしめす。この効果を利用することで混合物質中の目的物質を選択的にキャラクタリゼーションする等、赤外分光では不可能な高度な観測が可能である。

設備紹介（inVia Reflex）　ナノプラット　担当）賣市　幹大

メーカー：RENISHAW
型　　式：inVia Reflex
導入年度：平成 21 年度
（主な仕様）

レーザー	波長	488, 532, 633, 785 nm
分光器	分光器	シングルモノクロメータ (f=250 mm)
	分解能	1 cm^{-1}
	測定範囲	100 ～ 4000 cm^{-1}
検出器	CCD	Back-illuminated deep-depletion (578x386 Channel)
顕微鏡	顕微鏡	Leica 製（アダプター使用により Mitutoyo 社製長作動距離対物レンズ使用可）
	対物レンズ倍率	5, 10, 20, 50, 100
	空間分解能	1 µm（lateral）, 2 µm（depth）（x100）
冷却器	冷却方式	ヘリウム連続フロー（試料室は真空）
	温度領域	4～300K

特徴

本装置は近赤外から紫外に近い領域までの複数の励起レーザーを装備し、多数の励起光を駆使した共鳴ラマン測定が可能である。特に、最新の CCD カメラの採用により、近赤外励起光を利用する蛍光を回避しながらのラマン観測が効率化され、従来のラマン測定は難しいとされてきた発光性クロモファーを含む多くのバイオ系試料なども取り扱うことができる。ユニークな共焦点光学系により低背景雑音と高感度とが両立され、高い空間分解能を生かし２次元あるいは３次元マッピング測定も可能である。最大の特徴は波長校正、光路調整等の多くの作業がすべて自動化されたユーザーフレンドリーな操作環境にあり、装置操作の習熟に時間を費やすことなく有効なデータを素早く収集可能である。

測定方法

信号検出は実体顕微鏡を通じた後方散乱配置で行う。顕微鏡観測できる物質は形態を問わず試料として用いることができるが、散乱光が拡散されにくい平坦な面を持つ試料が有利。低温測定には熱伝導型の光学クライオスタットを使用する。試料空間を脱気するため揮発性試料の測定は困難。

超伝導磁石付希釈冷凍機

概要

希釈冷凍機とは、^{3}He と ^{4}He を混合するときに生じる吸熱効果を利用して、絶対零度（−273 ℃）近くまで温度を下げられる機器である。この希釈冷凍機を超伝導磁石に組み込み、有機導体、半導体、超伝導体の極低温における電子物性研究に用いられる。

設備紹介（Kelvinox 400）　担当）藤原　基靖

メーカー：Oxford
型　　式：Kelvinox 400
導入年度：平成 12 年度
（主な仕様）

最低温度	21 mK
冷却能力	400 μW（100 mK）
最大磁場	15 T （16 T:ラムダプレート使用時）

特徴

- 全自動ガスハンドリングシステム（Kelvinox IGH）の採用により、冷却工程が自動化されている。
- 冷却には、液体ヘリウム 100 L と液体窒素 30 L 程度が必要。また 4、5 日に一度、40L 程度の液体ヘリウムが必要。

備考

利用は、「希釈冷凍機の使用経験があり、セルやプログラム等の必要な装置の組み込みが行えること」が条件。

低温冷媒の供給設備

概要

低温冷媒の供給施設は明大寺地区、山手地区それぞれにあり液体ヘリウム及び液体窒素を供給している。

明大寺地区、山手地区のヘリウム液化機は順調に稼働しており、両地区における液体ヘリウムの供給体制は確立され、現在も安定した供給を維持している。

設備紹介（明大寺地区極低温施設） 担当）高山　敬史

⑴　液体ヘリウム関係

(a) 液体ヘリウム自動供給装置

(b) ヘリウム液化機

- メーカー　Linde 社
- 型式　L280
- 導入年度　平成 23 年
- 仕様　液化率　187ℓ/hr（純ガス、液体窒素使用時）、消費電力 3kW

(c) 液化圧縮機

- メーカー　Kaeser 社
- 型式　DSDX302
- 仕様　消費電力 160kW

(d) その他

- 液体ヘリウム貯槽　4000ℓ
- 回収圧縮機　40Nm^3/hr、50Nm^3/hr
- ガスバッグ　40m^3
- ガスホルダー　50m^3
- 長尺カードル　60m^3×36 、75m^3×25
- バッファータンク　10m^3×2

⑵　液体窒素関係

- 液体窒素自動供給装置

特徴

ヘリウム液化機の心臓部である膨張タービンの効率が良くなり、液体窒素予冷が無くてもヘリウムの液化ができる最新のシステム構成となっている。また、液化圧縮機の省エネ化が進み製造時におけるランニングコストも減少した。

設備紹介（山手地区極低温施設）　担当）水川　哲徳

⑴　液体ヘリウム関係

(a)　液体ヘリウム自動計量装置

(b)　ヘリウム液化機

- メーカー　Linde 社
- 型式　TCF-20
- 導入年度　平成 16 年
- 仕様　液化率　42 ℓ /hr（純ガス、液体窒素使用時）、消費電力 1.5kW

(c)　液化圧縮機

- メーカー　Kaeser 社
- 型式　OSD171
- 仕様　消費電力 90kW

(d)　その他

- 液体ヘリウム貯槽　5000 ℓ
- 回収圧縮機　40Nm^3/hr × 2
- ガスバッグ　35m^3、28m^3
- 長尺カードル　75m^3 × 50
- バッファータンク　6m^3

⑵ 液体窒素関係

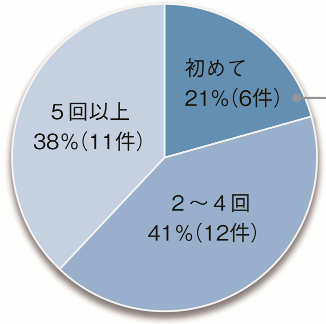
- 液体窒素自動供給装置 × 2

所外利用者アンケート報告

平成 24 年度に施設利用申請を頂きました方を対象に、アンケートを実施いたしました。お忙しい中ご協力頂き、ありがとうございました。

回答数　29 件、配布数　64 件（回収率　45%）

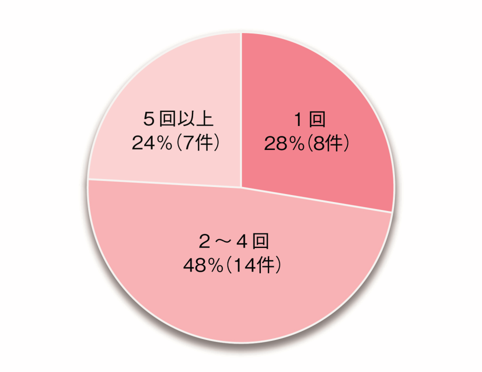
Q 1．機器センターの施設利用を申請したのは何度目ですか？



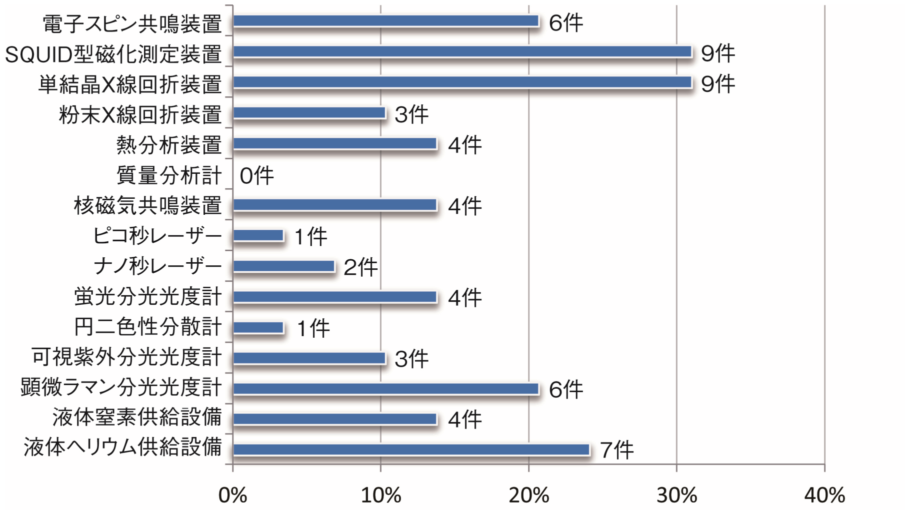
どこで知りましたか？

- 分子科学研究所または機器センターのホームページをみて（4 件）
- 大学連携研究設備ネットワークのホームページをみて（1 件）
- 知人から聞いて（0 件）
- 機器センターたよりをみて（0 件）
- 以前分子科学研究所に所属していたので知っていた（0 件）
- その他→これまでは、他申請者に随行する形で利用していた。（1 件）

Q 2．平成 24 年度 1 年間に来所した回数を教えてください。

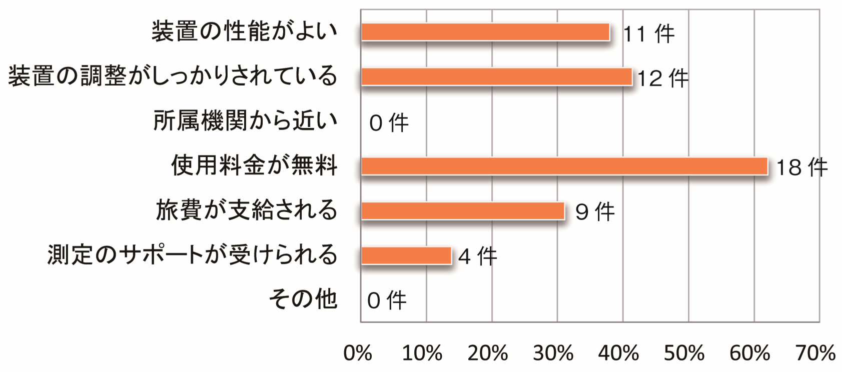


Q 3．平成 24 年度 1 年間に利用した設備すべてにチェックしてください。



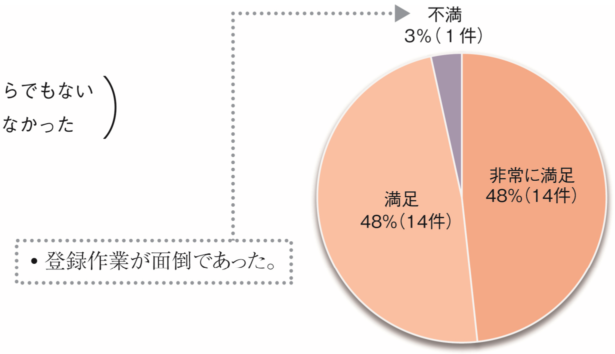
7．交流

Q４．分子科学研究所・機器センターの施設利用を利用した理由を２つまで選んでください。



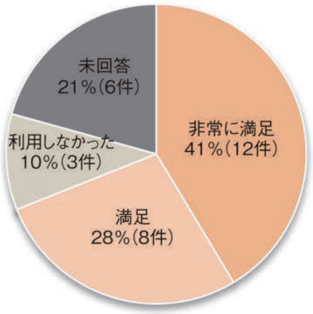
Q５．予約システムは使いやすかったですか？

（５：非常に満足、４：満足、３：どちらでもない
２：やや不満、１：不満、０：利用しなかった）



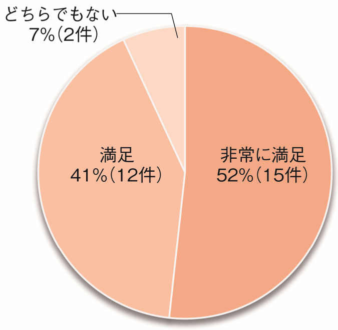
Q６．寒剤（液体窒素・液体ヘリウム）の供給体制はどうでしたか？

（５：非常に満足、４：満足、３：どちらでもない
２：やや不満、１：不満、０：利用しなかった）

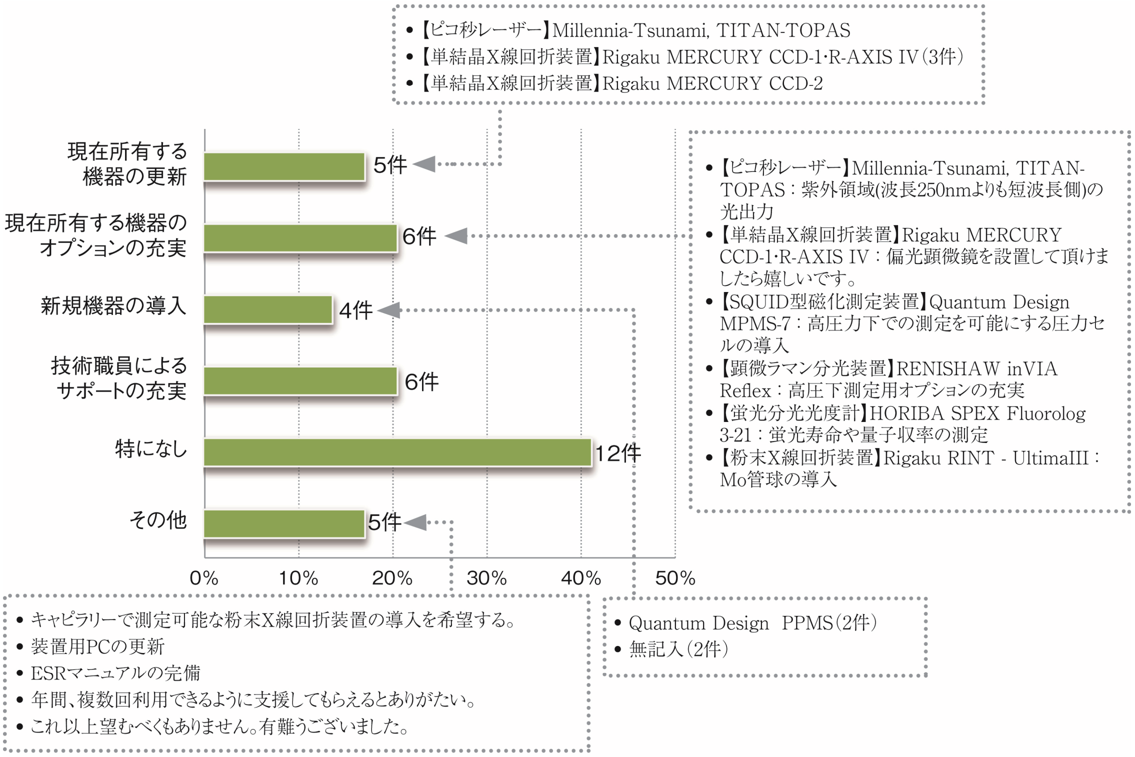


Q７．施設利用に満足できましたか？

（５：非常に満足、４：満足、３：どちらでもない
２：やや不満、１：不満）



Ｑ８．今後の機器センターに期待することを教えてください。具体的にあれば装置名なども記入してください（複数回答可）。



Ｑ９．その他ご要望やご意見がありましたら、自由にお書きください。

- VAC製Arグローブboxの新規導入を希望する。機器センター保有のMPMS用圧力セルを用いた実験を行いたいが、試料が大気中不安定な為、圧力セルへの試料の調整ができない。現在機器センターにあるグローブbagでは十分な不活性環境が維持出来ない為、試料が一瞬で分解、あるいは火を出して燃える事が過去の経験から予想される。グローブboxの導入をご検討いただければ幸甚です。
- ロッジの清掃日を明確にしていただきたい。実験の都合上、土曜あるいは日曜に訪所する事が多い。いつも秘書様方にはご足労をお掛けして申し訳ないが、その親切なご支援に感謝致しております。ロッジの清掃日について、ある時は土日を含めた3日間で清掃していただける時もあれば、全くそうでない時もあり、不公平と理不尽さを感じている。合計5日間以上滞在した時も一度も清掃をしていただけなかった事が数回あった。また外国人の利用マナーが極めて悪い。玄関周りには汚い靴が山積し、おまけに臭い。炊事場は何もかもが崩壊している。洗濯機の利用方法も悪く、下着が散乱し目に余るものがある。深夜に談話室で大声で騒いでいる姿も多く見かけられる。彼奴等を管理できないなら受け入れない様にしていただきたい。またロッジのスリッパがボロボロです。更新していただけますと幸甚です。事務の方々は利用されることがなく、実感がないと予想されます。毎日朝方まで働いて、約一週間ロッジで宿泊する、という体験をされることを提案致します。

7．交流

- 施設が充実しており、十分なデータを得ることができて大変助かりました。ありがとうございました。
- いつも大変お世話になっております。測定や解析の際に、たびたび色々お伺いしていて恐縮ですが、大変有難く思っております。今後とも何卒宜しくお願い申し上げます。
- 今後ともよろしくお願いします。
- 機器センターのスリッパの劣化が激しく、足が痛いので、新しくしてほしい。
- ＰＣの容量不足等で測定が始められなかったケースがありましたので、もしも予算に余裕がありますならば装置の PC を更新して頂けたらと思いました。利用させて頂いているのにこのような記載をすみません。
- ２回目（以降）も旅費を支給してほしい。
- いつもたいへんお世話になっています。昨年度、SQUID 型マグネットメータの超低磁場オプションを導入していただき、とても助かりました。今は特に思いつきませんが、また何かあれば要望をお知らせしたいと思います。よろしくお願いいたします。
- 本センターは 30 年ほど前にはよく利用し、しばらく利用していなくて、ここ数年また時々利用しているが、サポート体制が大変良くなった。
- いつもお世話になっております。ワンストップで複数の微小結晶の低温ラマンスペクトルが測定できるのでありがたく利用させてもらっています。もし可能でしたら、高さのあるクライオスタットや加圧装置も導入して、ダイヤモンドアンビルセルを取り付けられるようにしていただければ、高圧実験等測定の自由度が拡充され、今まで以上に利用実績が高くなると思います。ぜひ一度ご検討いただければ幸いです。
- こちらの大学で利用できない測定装置を、課題申請を出して利用できる分子科学研究所の施設利用制度は、私にとって欠くことのできない実験手段となっており、非常に有難く使用させていただいております。
- ＥＳＲを中心に測定しましたが、担当職員が一生懸命に手伝ってくださるので満足しています。また、測定内容の理論的な質問にも親切に答えていただいています。分子研は優秀な技術職員を揃えていると感じています。現在の分子研のサポート体制が続くことを願っています。
- ナノプラット関係かもしれませんが、ＴＥＭの装置を分子研で開放できないのは問題だと思います。大学で所有するには私立大学で敷居の高い装置であるので、分子研のような機関で、最も基本的な装置の１つだと思いますので、ご検討下さい。
- 不満は何もないのですが、せっかくの機会ですので要望をひとつだけ申し上げると、SQUID 装置のある実験室の椅子をもう少し座り心地の良いものを入れていただけると、というのはちょっとあります。贅沢な話で恐縮ですが。
- 測定試料が不安定な物質である場合、試料をその場で調整して必要があります。現状では、調整するスペースも器具も十分に整っていないと思います。本格的な施設は必要ないですが、溶液の濃度調整ができるぐらいの環境があれば、ありがたいです。また、試料によっては複数の物性測定を同時に行いたい場合があります。その場合、１日２日の滞在ではすべてを測定することができません。複数施設が利用できたり、比較的長期間施設を利用できるよう旅費等の支援をいただければ助かります。

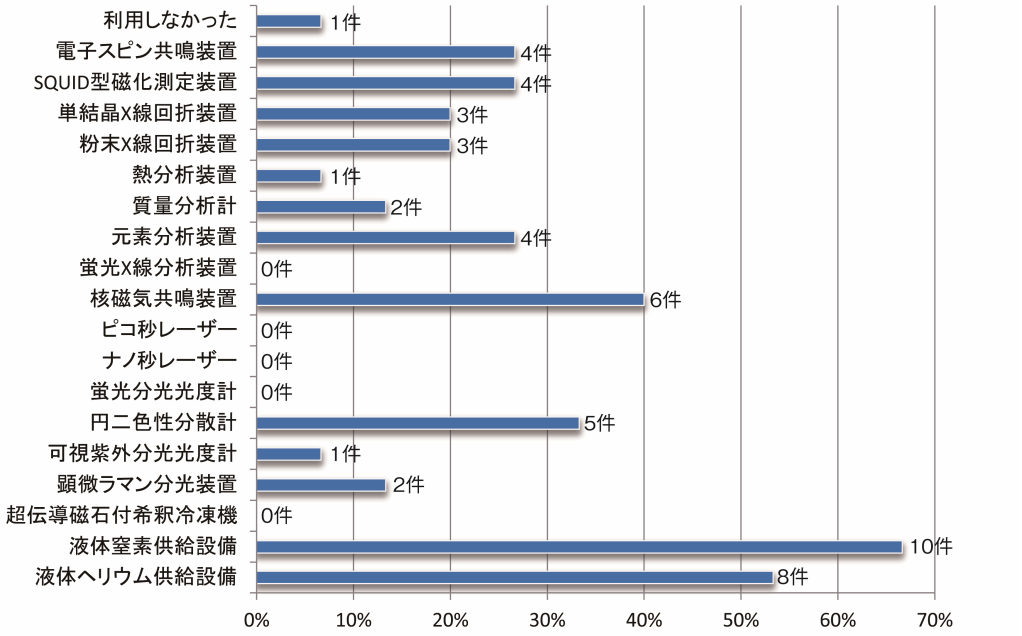
- いつもお世話になっています。平成 25 年 4 月から所属を滋賀県立大学に変えました。兵庫県立大のときは中古の単結晶 X 線回折装置（理学 IP, Rapid）が導入されたため、最近の 3 年間は利用頻度が下がってしまいました。IP に慣れていたので R-AXIS Ⅳで測定しようと思っていたら、システムが古くて動作が保障されないとのことで MERCURY の方で測定しました。機器の更新をしていただいたら利用頻度が上がると思います。よろしくお願いいたします。
- 予約が簡単で、担当者の対応も早く適切である。
- 色々と御面倒をお掛けしましたが、サポートが素晴らしく、本当に感謝しております。
- Q8 で R-AXIS Ⅳの更新、UltimaⅢのオプション充実を挙げたが、可能なら、むしろ明るい光源で高い分解能を持つ粉末 X 線回折装置の新規導入を希望。

所内利用者アンケート報告

分子科学研究所内の方を対象に、アンケートを実施いたしました。お忙しい中ご協力頂き、ありがとうございました。

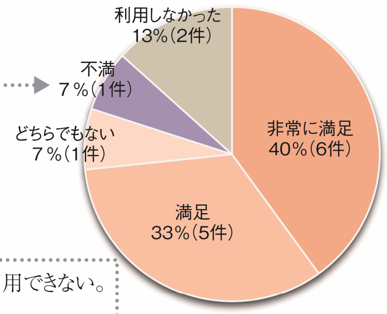
回答数　15 件、配布数　52 件（回収率　29%）

Q１．平成 24 年度１年間に利用した設備すべてにチェックしてください。



Q２．予約システムは使いやすかったですか？

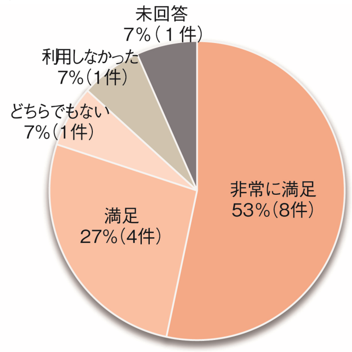
（5：非常に満足、4：満足、3：どちらでもない
2：やや不満、1：不満、0：利用しなかった）



• 日本語しか対応していないので、外国人研究者は利用できない。これは非常に問題である。

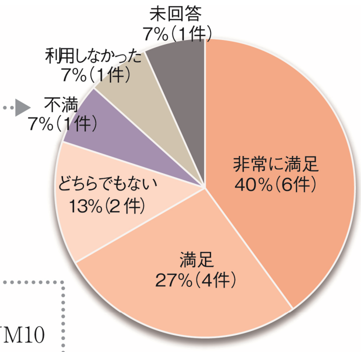
Ｑ３．寒剤（液体窒素・液体ヘリウム）の供給体制はどうでしたか？

（５：非常に満足、４：満足、３：どちらでもない
２：やや不満、１：不満、０：利用しなかった）



Ｑ４．共同利用機器の利用に満足できましたか？

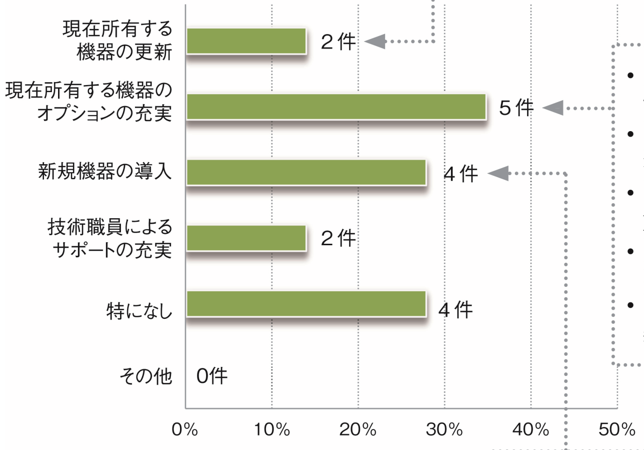
（５：非常に満足、４：満足、３：どちらでもない
２：やや不満、１：不満、０：利用しなかった）



- 装置の性能･機能
  【元素分析装置】J-SCIENCE LAB MICRO CORDER JM10

Ｑ５．今後の機器センターに期待することを教えてください。具体的にあれば装置名なども記入してください（複数回答可）。

- 【円二色性分散計】JASCO J-720WI
- 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaIII



- 【電子スピン共鳴装置】Bruker E500：パルスESRオプション
- 【顕微ラマン分光装置】RENISHAW inVIA Reflex：透過照明装置
- 【SQUID型磁化測定装置】Quantum Design MPMS-XL7：RSO測定用オプション
- 【電子スピン共鳴装置】Bruker E500：ディスパージョンモード測定ユニット
- 【電子スピン共鳴装置】Bruker E500：ENDOR測定装置のラジオ波アンプのパワーアンプ高出力化

- DLS, QCM-D, AFM, 共焦点レーザー蛍光顕微鏡
- Quantum Design　PPMS
- 原子間力顕微鏡（AFM）
- 元素分析装置（ハロゲン、S対応）

7．交流

Ｑ６．その他ご要望やご意見がありましたら、自由にお書きください。

- ESR のディスパージョンモードは、共同利用施設が保有する機器として装備すべきユニットだと思います。
- 元素分析装置が長期にわたって更新されていないのは、共同利用研としていかがなものか。最優先で更新されるべきかと考えます。実際非常に不便をしています。
- 計算科学研究センターは毎年利用させて頂いておりますが、機器センターは利用しておりません。お役に立てず、申し訳ありません。
- 特別にありません。いろいろと共同利用でサポートしていただき感謝しております。
- 電子スピン共鳴装置 Bruker E500 の ENDOR オプションは非常に強力で、ラジカル分子種の構造決定には不可欠な装置である。このオプションのラジオ波（RF）アンプの出力を 2 倍にすれば、それだけ装置としての有効性が決定的に向上する。故に、是非とも高出力化を望む。

機器センター長からのコメント

利用者の皆様からのアンケートの結果は、機器センターの運営を改善していく上で毎回参考にさせて頂いています。今回の結果で注視すべきは、所外から初めて機器センターを利用された方々が、研究所自体もしくは機器センターのホームページを通じて施設利用をお知りになったという点です。インターネットが主たる情報収集ツールとなりつつある現在、ホームページの整備は喫急の課題です。分子研ホームページは全面改訂を行い、平成 26 年度当初からリニューアル公開されます。大学共同利用機関法人としての重要なミッションの１つである「共同利用研究」について、できるだけ分りやすく全体像が把握できるようなページ構成を目指し、特に、機器センターを含めた各種施設における利用の仕方が初めての方でも良く理解できるように説明しています。分子研の所有する汎用装置の全てが一目で分るようなページも作成しました。共同利用研究の申請自体も、平成 25 年度からウェブ上で行うようになっています。スタート時点ではいさかか分りにくい表現もあり皆様にご迷惑をお掛けしましたが、こちらも大幅な改定作業を行って利便性の向上を図っております。これらの所全体の取り組みと連動して、今後は機器センターのホームページの改定作業も進めていきたいと考えています。

所外・所内研究者の方々ともに、施設利用自体や予約システムについて概ねご満足頂いていることについては、率直に喜びを感じます。なお、予約システムが日本語対応のみで外国人研究者が利用困難であるとのご指摘に対しては、部分的ではありますが平成 26 年度より英語表記もスタートします。一点、機器センター自体の問題ではありませんが、所内宿泊施設（いわゆるロッジ）の現状について強い改善のご要望があることは、看過できない問題です。分子研の共同研究委員会や事務センターへ伝え、早急な対応を求めます。

機器センター所有装置のアップグレード等のご要望に関しましては、今回のご意見は平成 24 年度の施設利用に対するものですので、既にいくつかは対応済みとなっています。例えば、電子スピン共鳴装置のラジオ波アンプの高出力化や、大気中では不安定な試料の調整用グローブボックスの導入などです。とはいえ、毎度のことながら全てのご要望にお応えできているわけではありません。分子研全体として、長期的な施設充実プランを策定することは不可避です。特に、今般の厳しい財政状況を鑑みると、分野や装置を絞り込んだ重点的な整備が１つの方向性となると考えています。このような取り組みに対しましても、ユーザーの方々からの声を貴重な指針とさせて頂きます。今後とも積極的にご意見をお寄せ頂ければ幸いです。

国際研究協力事業報告「ESR 国際連携検討会」

分子科学研究所　物質分子科学研究領域　中村　敏和

１．はじめに

2013 年 10 月 28 日（月）～29 日（火）に、分子科学研究所明大寺キャンパス研究棟 201 セミナー室「ESR 国際連携検討会」を開催した。光合成中心や太陽電池材料物質の ESR 物理化学研究で著名なベルリン自由大学の Robert Bittl教授が来日する折に触れ分子科学研究所へ訪問頂き、分子科学研究所における ESR 研究の国際的な役割を討論して頂いた。

10 月 28 日（月）は、ESR に限らず広く分子科学研究所の施設ならびに研究内容を理解して頂くために、大峯巖所長との討論の後、主要施設の見学と関連する教員との議論を行って頂いた。翌 10 月 29 日（火）には、大島康裕機器センター長ならびに分子・物質合成プラットフォーム責任者である横山利彦教授、また本国内の代表的な ESR 研究者に集まって頂き、分子科学研究所を中心としたベルリン自由大学との ESR 研究の国際的連携ならびに、今後の共同利用研のあり方について検討を行った。

分子科学研究所は多周波・パルス ESR など先端的な ESR 分光器が整備されており、大学共同利用機関として国内の多くの研究者に先端 ESR 計測の場を提供している。また創立以来、物理化学・物性研究が盛んに行われており、ESR コミュニティの学術的なコアとしても機能している。しかしながら，計測手法の高度化、学術的研究の深化により、特に先端計測分野では国際連携ならびに技術面での情報交換が不可欠である。ベルリン大では、BeJEL という ESR プロジェクトが進行中であり、Bittl 教授はその中心的な人物である。Bittl 教授には、ドイツにおける ESR ファシリティ・プロジェクタ型研究の紹介、国際的な ESR 研究動向について講演ならびに討論を行って頂いた。前年度まで分子科学研究所に在籍していた新潟大の古川貢准教授には、機器センターの ESR を用いた先端研究例を紹介して貰った。また、神戸大の太田仁教授には国内外の ESR コミュニティの動向を、他の ESR 研究者には各分野の研究動向と研究連携のロードマップについて提案を頂き、意見交換を行った。偶然、ロシアの ESR 研究の中心拠点であるロシア科学アカデミー（ノボシビルスク）の Matvey Fedin 教授が来日していたので、急遽この検討会に参加頂きロシアの研究動向ならびに国際連携についても議論する機会を得た。

討論の時間だけでなく休息時間ならびに昼食時間も密に利用して、分子科学研究所をコアとする日本の ESR コミュニティとの連携の可能性などを討論する機会を得ることが出来た。

２．プログラム概要

Oct.　28 (Mon)

17 : 15– 19 : 00	Reception
19 : 30 – 22 : 00	Free Discussion I

Oct.　29 (Tue)

7 : 40 – 8 : 50	Lab Tour (for Japanese Participants)
9 : 10 – 9 : 20	Prof. Toshikazu Nakamura (IMS) "Opening address"
9 : 20 – 9 : 40	Prof.　Ko Furukawa (Niigata Univ.)

	"Advanced ESR Research Work in IMS"
9 : 40 – 10 : 10	Prof. Hitoshi Ohta (Kobe Univ., IES Vice President) "Overview of IES. APES, SEST, and High Field ESR in Kobe"
10 : 10 – 10 : 40	Prof. Tatsuhisa Kato (Kyoto Univ.) "ESR spectrum of molecular complex"
10 : 40 – 11 : 10	Coffee
11 : 10 – 12 : 00	Prof. Bittl (Freie Universität Berlin) "EPR in biophysics and materials research at the 'Berlin Joint EPR Laboratory' (BeJEL)"
12 : 00 – 14 : 00	Lunch
14 : 00 – 14 : 20	Prof. Tadaaki Ikoma (Niigata Univ.) "Study on Magnetoconductance using Pentacene /C60-Junction Organic Solar Cell"
14 : 20 – 14 : 40	Prof. Kazunobu Sato (Osaka City Univ.) "Organic Open-Shell Systems as Models for Molecular Spin Quantum Computers and Spin Manipulation by Pulsed ESR Technology"
14 : 40 – 15 : 00	Prof. Matvey Fedin (Novosibirsk, Russia) "EPR studies of "breathing" molecular compounds"
15 : 00 – 15 : 30	Coffee
15 : 30 – 16 : 00	Prof. Shinichi Kuroda (Nagoya Univ.) "ESR observation of field-induced charge carriers in organic transistors"
16 : 00 – 16 : 30	Prof. Yasuhiro Kobori (Kobe Univ.) "Transient EPR Studies on Primary Charge Separations in Organic Photovoltaics and Photosynthesis"
16 : 30 – 16 : 50	Dr. Wakikawa (Niigata Univ.) "Photocarrier Dynamics in Fullerene-Based Single Layer Photovoltaic Cell"

二次元高分子の合成及び構造特徴の解明

分子科学研究所　物質分子科学研究領域　　江　東林

はじめに

高分子は、化学結合で小分子をつないでできる巨大分子です。一次元的に連結した場合、長い線状高分子を形成し、また、枝分かれるように繋がっていくと、三次元構造を与えることができます。これらの従来の高分子に対して、私たちは、シートのように平らで、分子１層が原子厚みを持つ二次元高分子の合成に挑戦しています[1,2]。本稿では、我々の取り込みを中心に、二次元高分子の設計戦略、合成手法、及び構造特徴の解明について紹介します。

設計戦略・合成手法

二次元高分子を設計するには、モノマー構造に関して、特定な幾何学形状を持つことが重要です。これは、成長点において、各連結部位の中心軸が二次元平面から逸脱しないように抑制する必要があるからです。図１のように、モノマーの形状に対して位相幾何学的に設計することが必要です。

二次元高分子は、分子の連結により規則正しいナノ多孔構造を生み出すユニークな高分子です（図１）。二次元高分子は、炭素以外に、様々な元素を分子に導入することができ、また、特異な多孔構造を固有しているため、グラフェンとは異なる構造的な特徴を持ちます。

二次元高分子を合成するには、平衡反応に支配された動的共有結合反応を用いることが必要です。したがって、平衡反応を左右させ、結晶成長及び欠陥構造の修復を有利に働く熱力学的な反応条件を見いだすことがポイントです[1,2]。

ボロン酸と水酸基との縮合反応は、代表的な動的共有結合反応の一つで、形成されたボロンエステル結合によって両モノマーを同じ平面に保つことができます。したがって、幾何学通り

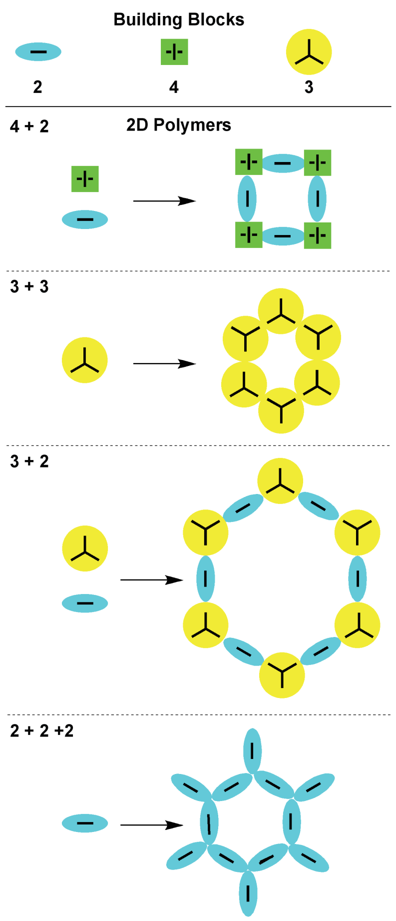


図１．二次元高分子の設計戦略と結合パターン。

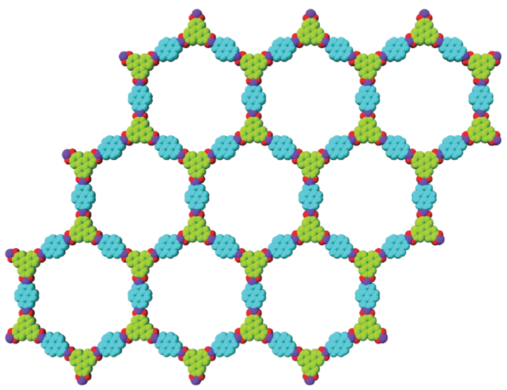


図２．トリフェニレン（緑色）とピレン（青色）からなる二次元高分子。

にモノマーの構造を設計することができれば、ボロン酸と水酸基との縮合反応による二次元高分子の合成が可能となります。私たちは、トリフェニレンとピレンからなるモノマーを用いて、溶媒熱条件下で重縮合反応を行い、二次元高分子の合成を試みました。幸運なことに、二次元高分子をつくることに成功しました（図２）[3]。

具体的に、下記の通り合成実験を行います。10ミリリットルのアンプル瓶に、化学当量比でモノマーとなるトリフェニレンとピレン誘導体を入れ、真空吸引及びアルゴン置換を繰り返して空気を取り除きます。シリンジで無水1,3,5－トリメチルベンゼンとジオキサン（3:1体積比）の混合溶媒（2ミリリットル）をアルゴン保護下で注入します。液体窒素下で溶液を凍結させ、真空を引いて空気を取り除きます。室温で融解させ、凍結した後空気を取り除くことを５回繰り返して行います。アンプル瓶を封管し、120度の恒温槽にて３日反応させ、室温まで冷却します。析出した固体を遠心分離により収集し、無水アセトンで５回洗浄し、真空下で120度にて乾燥させ、収率90％[3]。

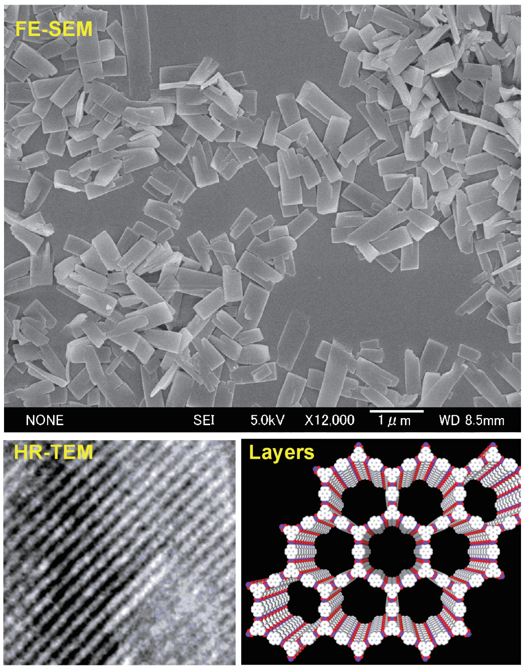


図３．電子顕微鏡写真と積層構造。

構造特徴の解明

二次元高分子は、構成ユニットや連結方式、ポア形状、ポアサイズなど面内の周期構造を一次構造、また、積層モードやチャンネル構造、カラム配列などを高次構造と分けることができます[1,2]。高次構造と関連して、二次元高分子は、どのようなマクロ的な形を持つのか興味深いことです。

電子顕微鏡で二次元高分子を観察すると、トリフェニレンとピレンからなる二次元高分子はベルト状形態を有します（図３、FE-SEM）。さらに、透過型電子顕微鏡で観察すると、ベルトの中には、分子シートが真直ぐに延び、お互いに平行に積み重なっていることが分かりました（図３、HR-TEM）[3]。二次元高分子の形状は、原子層の形に左右されるが、モノマーの構造にも大きく依存し、ベルト状以外に、キューブ状や円盤状など多彩多様です。

二次元高分子は、どのように積層しているのだろうか。X線回折法という手法を用いて構造を解明することを試みました。二次元高分子は、周期構造を有するため、極めて強いX線回折シグナルを示し、そのパターンを解析することで、結晶群を決定することが可能です[2-7]。DFTB計算から、結晶安定化エネルギーが積層パターンを決める要因であることが明らかになりました。構成成分が0－1Å程度横滑りした積層するものがほとんどで、層間に働く$\pi-\pi$相互作用が最大化になるように原子層を配列していることが分かりました（図３、layers）[3-11]。

二次元高分子では、積層することで一次元チャンネル構造をもたらします。細孔サイズや形状は、モノマーの形、サイズ、及び結合パターンによって規定され、原理的に分子設計することが可能です。二次元高分子は、多孔のため、１グラムあたり数百から数千平方メートルという巨大な表面積を持ち、ガス吸着・貯蔵の媒体

として魅力的です[3-11]。

私たちは、π電子系の構造特徴に着眼し、これまでに、様々なπ電子系二次元高分子の構築に成功しました[3-11]。また、ガス吸着をはじめ、半導体としての機能、センシング機能、光伝導性、蛍光発光能、光誘起電子移動機能、電荷分離機能、光電変換機能、及び触媒機能の開拓に成功しました[3-11]。二次元高分子は、特異な周期構造を有する多孔性高分子として、どのような光や電子機能、ガス吸着機能を秘められているのか、今後の更なる展開が期待されます。

おわりに

本研究の一部は、分子科学研究所、機器センターの装置を用いて行われました。新奇物質を創生するには、物質構造を明らかにするための汎用装置の充実が極めて重要です。特に、薄膜状態の構造解明を可能とするＸ線回折装置が欠かせないもので、今後重点に装備していくことを強く望みます。

参考文献

[1] D. Jiang, X. Ding and J. Guo, Supramolecular Soft Matter: Applications in Materials and Organic Electronics, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA. 2011.

[2] X. Ding, X. Feng, D. Jiang, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 6010-6022 (2012).

[3] S. Wan, J. Guo, J. Kim, H. Ihee and D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 8826-8830 (2008).

[4] S. Wan, J. Guo, J. Kim, H. Ihee and D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 5439-5442 (2009).

[5] X. Ding, J.Guo, X. Feng, Y. Honsho, J. Guo, S. Seki, P. Maitarad, A. Saeki, S. Nagase, D. Jiang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **50**, 1289-1293 (2011).

[6] X. Feng, L. Chen, Y. Dong, D. Jiang, *Chem. Commun.* **47**, 1979-1981 (2011).

[7] X. Ding, L. Chen, Y. Honsho, X. Feng, O. Saengsawang, J. Guo, A. Saeki, S. Seki, S. Irle, S. Nagase, P. Vudhichai, D. Jiang, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 14510-14513 (2011).

[8] X. Feng, L. Chen, Y. Honsho, O. Saengsawang, L. Liu, L. Wang, A. Saeki, S. Irle, S. Seki, Y. Dong, D. Jiang, *Adv. Mater.* **24**, 3026-3031 (2012).

[9] J. Guo, Y. Xu, S. Jin, L. Chen, T. Kaji, Y. Honsho, M. A. Addicoat, J. Ki, A. Saeki, H. Ihee, S. Seki, S. Irle, M. Hiramoto, J. Gao, D. Jiang, *Nature Commun.* **4**: 2736 doi: 10.1038/ncomms3736 (2013).

[10] S. Jin, K. Furukawa, M. Addicoat, L. Chen, S. Takahashi, S. Irle, T. Nakamura, D. Jiang, *Chem. Sci.* **4**, 4505-4511 (2013).

[11] H. Xu, X. Chen, J. Gao, J. Lin, M. Addicoat, S. Irle, D. Jiang, *Chem. Commun.* **50**, 1292–1294 (2014).

平成24年度共同利用採択課題一覧

施設利用
【前期】

整理番号	申請区分	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
1	通年	東京理科大学 理学部第二部化学科	講師	秋津　貴城	キラル銅錯体と分子磁性複合系の磁性測定	【SQUID型磁化測定装置】
2	通年	九州大学 先導物質化学研究所	特任助教	姜　舜徹	光誘起相転移を示す金属錯体の微結晶構造解析と磁気的物性解明	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3, 【SQUID型磁化測定装置】
3	通年	千葉大学大学院 薬学研究院	教授	根矢　三郎	ヘムタンパク質の反応性を制御するポルフィリン立体構造因子の究明	【電子スピン共鳴装置】
4	通年	核融合科学研究所 炉工学研究センター	助教	菱沼　良光	MgB_2超伝導体の超伝導特性におけるホウ素同位体効果	【SQUID型磁化測定装置】
5	通年	兵庫県立大学 大学院物質理学研究科	准教授	小林　本忠	窒化硼素ドーピング化合物の構造と物性	【SQUID型磁化測定装置】, 【電子スピン共鳴装置】, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII, 【顕微ラマン分光装置】RENISHAW inVIA Reflex
6	通年	首都大学東京 大学院理工学研究科	准教授	藤田　渉	新規分子磁性体の結晶構造と磁気的性質	【SQUID型磁化測定装置】, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
7	通年	岐阜大学 工学部	教授	嶋　睦宏	NiFeナノ粒子、Co/Pdナノ細線、Fe/Ptナノ粒子の磁気的性質の解明	【SQUID型磁化測定装置】
8	通年	名城大学 理工学部	教授	丸山　隆浩	Pt触媒を用いた単層カーボンナノチューブ成長に関する研究	【顕微ラマン分光装置】RENISHAW inVIA Reflex
9	通年	名古屋市立大学大学院 薬学研究科	助教	矢木　宏和	NMRを利用した複合糖質およびマルチメインタンパク質の動的構造解析	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-ECA600
10	通年	東邦大学 医学部　化学研究室	准教授	大胡　惠樹	外部刺激応答性を利用した新規機能性物質の開発	【電子スピン共鳴装置】, 【SQUID型磁化測定装置】
11	通年	法政大学 生命科学部	教授	緒方　啓典	新規ナノマテリアルの物性評価	【顕微ラマン分光装置】RENISHAW inVIA Reflex, 【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500, 【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21, 【質量分析計】Applied Biosystems Voyager DE-STR, 【SQUID型磁化測定装置】, 【電子スピン共鳴装置】, 【SQUID型磁化測定装置】, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
12	通年	愛知学院大学 薬学部	助教	小川　法子	シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶X線構造解析	【単結晶X線回折装置】, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
13	前期	静岡大学 工学部　共通講座	教授	植田　一正	結晶構想解析による分子間相互作用の見積もりと固相電子移動過程の相関	【単結晶X線回折装置】, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
14	前期	名古屋工業大学大学院 未来材料創生工学	准教授	小澤　智宏	NOセンシング材料の磁気的評価	【電子スピン共鳴装置】, 【SQUID型磁化測定装置】

10. 共同利用採択課題一覧

整理番号	申請区分	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
15	通年	名古屋工業大学大学院 工学研究科	准教授	小野　克彦	新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	【単結晶X線回折装置】,【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3,【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
16	通年	首都大学東京 理工学研究科	教授	溝口　憲治	金属を導入したDNAの電子状態の解明	【電子スピン共鳴装置】,【SQUID型磁化測定装置】
17	通年	京都大学大学院 工学研究科	教授	清水　芳久	水環境中天然有機物(NOM)および下水2次処理水中有機物（Efom)のNMR法によるキャラクタリゼーション	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-ECA600, JEOL JNM-LA500
18	通年	東京工業大学大学院 有機・高分子物質専攻	助教	芦沢　実	有機デバイスに用いる有機半導体材料の構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
19	通年	豊橋技術科学大学 環境・生命工学系	助手	藤澤　郁英	X線結晶構造解析による分子構造の決定	【単結晶X線回折装置】,【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
20	通年	秋田工業高等専門学校 物質工学科	准教授	丸山　耕一	誘導体-磁気体ハイブリッド素子の磁気的特性	【SQUID型磁化測定装置】
21	通年	富山大学 先端ライフサイエンス研究拠点	特命助教	岡　芳美	フラビン発色団を有する化合物における光誘起ラジカルペアの寿命評価	【電子スピン共鳴装置】
22	前期	生理学研究所 脳形態解析研究部門	准教授	田渕　克彦	シナプスタンパク質のフォールディングが精神機能に及ぼす作用の検出	【熱分析装置】MicroCal VP-DSC, MicroCal iTC200
23	通年	高知大学 教育研究部	准教授	上田　忠治	新規ポリオキソメタレート錯体の合成とその電気化学的酸化還元反応メカニズムの解明	【電子スピン共鳴装置】
24	通年	国立極地研究所 生物圏研究グループ	特任研究員	小杉真貴子	南極の陸上に生育する光合成生物の乾燥時における光阻害防御の光波長依存特性の研究	【電子スピン共鳴装置】
25	前期	広島大学大学院 理学研究科	教授	井上　克也	アルカリ金属ドープポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	【電子スピン共鳴装置】,【SQUID型磁化測定装置】
26	前期	奈良女子大学大学院 自然科学系研究院	教授	飯田　雅康	アルキルエチレンジアミン系イオン液体中での遷移金属イオンの選択的相互作用	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-LA500
27	前期	愛媛大学 大学院理工学研究科	助教	白旗　崇	新規電子供与体を成分とする分子性導体の低温物性・構造に関する研究	【単結晶X線回折装置】,【電子スピン共鳴装置】,【SQUID型磁化測定装置】
28	前期	大阪市立大学 理学研究科	准教授	塩見　大輔	有機ラジカル結晶の低温X線結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】　微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
29	前期	名古屋工業大学　セラミックス基盤工学研究センター	准教授	安達　信泰	酸化物磁性薄膜および多孔体の磁気特性および磁気共鳴に関する研究	【電子スピン共鳴装置】,【SQUID型磁化測定装置】
30	前期	東北大学 多元物質科学研究所	助教	松岡　秀人	高感度ESR法による光合成タンパクの構造研究	【電子スピン共鳴装置】
31	前期	北海道大学 大学院工学研究科	助教	柏本　史郎	ｓｐ電子系準結晶の磁気特性	【SQUID型磁化測定装置】
32	前期	大阪大学 大学院工学研究科	助教	小野田　晃	非天然金属中心を有するヘム及びノンヘム人口鉄含有タンパク質変異体の電子状態解析	【電子スピン共鳴装置】
33	前期	名古屋工業大学 大学院工学研究科	准教授	小野　晋吾	ガラス基板へのレーザードープに関する研究	【ピコ秒レーザー】Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS,【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21,【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500

整理番号	申請区分	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
34	前期	島根大学 総合理工学部	准教授	池上　崇久	フタロシアニン金属錯体の磁気特性の研究	【電子スピン共鳴装置】, 【SQUID型磁化測定装置】
35	前期	静岡県立大学 環境科学研究所	教授	坂口　眞人	メカノケミカル重合によるセルロース高機能化材料の創製	【電子スピン共鳴装置】
36	前期	名古屋大学 大学院工学研究科	特任教授	石川　健治	カビ胞子の生存に係わるフリーラジカル信号の同定	【電子スピン共鳴装置】
37	前期	基礎生物学研究所 細胞間シグナル研究部門	教授	松林　嘉克	高等植物のグリコペプチドホルモンCLV3のコンフォメーション解析	【熱分析装置】 MicroCal VP-DSC, MicroCal iTC200
38	前期	金沢大学 理工研究域物質化学系	博士研究員	西　信之	多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素への金属担持	【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII, 【熱分析装置】 *2
39	前期	九州大学 大学院薬学研究院	助教	白石　充典	GPCR-リガンド相互作用の熱力学的解析	【熱分析装置】 MicroCal iTC200
40	前期	兵庫県立大学 大学院工学研究科	准教授	北村　千寿	多環式芳香族炭化水素のX線結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
41	前期	静岡大学 理学部	助教	仁科　直子	新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	【フーリエ変換赤外分光光度計】Bruker IFS66v 【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21, 【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500, 【単結晶X線回折装置】
42	前期	早稲田大学 大学院先進理工学研究科	准教授	井村　考平	金ナノクラスターの近赤外発光分析	【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21
43	前期	大阪大学 大学院理学研究科	助教	山本　貴	分子性超伝導体β"-型$(ET)_2(Re_4)$における電荷不均一性の起源の研究	【顕微ラマン分光装置】RENISHAW inVIA Reflex
44	前期	大阪大学 理学研究科	助教	高見　剛	新規物質Ag_2CoO_2の磁性に関する研究	【SQUID型磁化測定装置】
45	前期	室蘭工業大学 大学院工学研究科	助教	馬渡　康輝	共役系高分子の磁気特性に関する研究	【SQUID型磁化測定装置】
46	前期	室蘭工業大学 大学院工学研究科	助教	馬渡　康輝	側鎖に嵩高い光学活性基を有するπ共役系ラセン高分子の溶媒及び温度依存性	【円二色性分散計】JASCO J-720WI
47	前期	奈良先端科学技術大学院大学	准教授	松尾　貴史	タンパク質空間における金属イオンのレドックス挙動とタンパク質構造との相関関係の解明	【電子スピン共鳴装置】
48	前期	東邦大学 理学部	准教授	加知　千裕	磁気的フラストレーションを持つ層状二次元ネットワーク錯体の磁化緩和ダイナミクス	【SQUID型磁化測定装置】
49	前期	茨城大学 理学部	教授	大友　征宇	金属イオンと光光合成捕集タンパク質との相互作用の検出	【熱分析装置】MicroCal VP-DSC, MicroCal iTC200
50	前期	神戸大学大学院 理学研究科	准教授	高橋　一志	２段階スピン転移を示すスピンクロスオーバー錯体の光誘起準安定相の構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
51	前期	神戸大学 自然科学系先端融合研究	助教	木村　行宏	光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	【熱分析装置】MicroCal VP-DSC, MicroCal iTC200

【後期】

整理番号	所　　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
1	静岡大学 理学部	助教	仁科　直子	新規機能性錯体分子の構造と光学的性質	【フーリエ変換赤外分光光度計】Bruker IFS66v/S,【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500,【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21,【単結晶X線回折装置】*1
2	大阪大学 理学研究科	助教	高見　剛	Ag_xCoO_2の磁性と$LaCoO_3$のスピン転移に関する研究	【SQUID型磁化測定装置】
3	金沢大学 理工研究域物質化学系	博士研究員	西　信之	多層グラフェン壁を持つメソ多孔性炭素へのシリコン担持	【熱分析装置】*2,【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
4	静岡大学 工学部　共通講座	教授	植田　一正	非平面π共役系分子の結晶構造解析による分子間相互作用の見積りと電子移動経路の相関	【単結晶X線回折装置】*1
5	茨城大学 理学部	教授	大友　征宇	金属イオンと光合成光補集タンパク質との相互作用の検出	【熱分析装置】MicroCal iTC200, MicroCal VP-DSC
6	名古屋工業大学　セラミックス基盤工学研究センター	准教授	安達　信泰	酸化物磁性薄膜および多孔体の磁気特性および磁気共鳴に関する研究	【SQUID型磁化測定装置】,【電子スピン共鳴装置】
7	静岡大学 創造科学技術大学院	教授	朴　龍洙	蛍光を有する磁気ナノビーズの開発及び計測における応用	【SQUID型磁化測定装置】
8	三重大学 大学院　生物資源学研究科	准教授	青木　恭彦	コイ血液由来の糖鎖（ペンタオース）のNMRスペクトル（ROESY）の測定	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-ECA600
9	大阪市立大学 理学研究科	准教授	塩見　大輔	新機能性有機結晶の低温X線結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
10	名古屋工業大学 大学院工学研究科	准教授	小野　晋吾	ガラス基板へのレーザードープに関する研究	【ピコ秒レーザー】Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS,【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21,【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500
11	北海道大学 大学院工学研究科	助教	柏本　史郎	Pd-Si-RE（希土類）系新規準結晶関連合金の磁気特性	【SQUID型磁化測定装置】,【熱分析装置】*2
12	静岡県立大学 環境科学研究所	教授	坂口　眞人	ナノ粒子化に伴う木質セルロースの高機能化	【電子スピン共鳴装置】
13	岐阜大学 工学部	助教	三輪　洋平	ポリエチレン系アイオノマーの熱分析	【熱分析装置】*2
14	東北大学 多元物質科学研究所	教授	佐藤　俊一	微粒子レーザープロセス	【ナノ秒レーザー】フッ素系エキシマーレーザー　Lambda Physik Compex110F
15	基礎生物学研究所 細胞間シグナル研究部門	教授	松林　嘉克	高等植物グリコペプチドホルモンCLV 3のコンフォメーション解析	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-LA500, JEOL JNM-ECA600
16	神戸大学自然科学系先端融合研究	助教	木村　行宏	光合成蛋白質の耐熱化機構の解析	【熱分析装置】MicroCal iTC200, MicroCal VP-DSC
17	広島大学 大学院理学研究科	教授	井上　克也	アルカリ金属ドープポリアセチレンラジカルポリマーのスピン状態および磁気状態の観測	【SQUID型磁化測定装置】,【電子スピン共鳴装置】
18	信州大学 理学部	准教授	太田　哲	可逆的な構造変化を示す新規有機酸化還元系の設計と合成	【単結晶X線回折装置】*1

整理番号	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
19	東京理科大学 理学部第二部化学科	准教授	秋津　貴城	キラルアカセン誘導体金属錯体の微小単結晶のX線構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
20	東京工芸大学 工学部	准教授	比江島俊浩	TEMPOラジカルを側鎖に導入したポリグルタミンのらせん磁性に関する研究	【電子スピン共鳴装置】
21	名城大学 農学部	研究員	平松　孝章	逆ペロブスカイト型化合物(TSF)$_3$[(Mo$_6$X$_{14}$)X](X=Cl，Br)の極低温構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
22	兵庫県立大学 大学院物質理学研究科	助教	満身　稔	一次元ロジウム - ジオキソレン錯体の結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
23	京都大学 大学院医学研究科	助教	野村　紀通	哺乳類トランスポーター蛋白質と基質・阻害剤の分子間相互作用の解析	【熱分析装置】MicroCal iTC$_{200}$
24	大阪大学 産業科学研究所	助教	真嶋　哲朗	金属酸化物ナノ粒子集合体の磁気特性解析	【SQUID型磁化測定装置】
25	島根大学 大学院総合理工学研究科	助教	池上　崇久	ランタン型二核金属錯体の磁気特性の研究	【SQUID型磁化測定装置】, 【電子スピン共鳴装置】

【機器の表記について】

◎【SQUID型磁化測定装置】 : Quantum Design MPMS-7　または　MPMS-XL7

◎【電子スピン共鳴装置】 : Bruker EMX Plus　または　E500

◎【単結晶X線回折装置】*1 : Rigaku MERCURY CCD-1　または　CCD-2

◎【熱分析装置】*2 : TA Instruments TGA2950 または SDT2960 または DSC2920

平成25年度共同利用採択課題一覧

施設利用
【前期】

整理番号	申請区分	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
1	通年	東京工業大学 理工学研究科	助教	芦沢　実	新規な有機半導体の構造解明	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
2	通年	静岡大学 工学部	教授	植田　一正	分子内電荷移動錯体の結晶構造解析による分子配列の解明と分子間相互作用の解明	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
3	通年	静岡大学 理学部	助教	仁科　直子	新規な多核金属錯体の合成とX線結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
4	通年	愛知学院大学 薬学部	助教	小川　法子	シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶X線構造解析	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
5	前期	名古屋工業大学 大学院物質工学専攻	准教授	濱中　泰	サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の発光特性の研究	【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21, 【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500
6	前期	豊橋技術科学大学 環境・生命工学系	助手	藤沢　郁英	X線結晶構造解析による分子構造の決定	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
7	前期	早稲田大学 大学院先進理工学研究科	准教授	井村　考平	シアニンJ会合体の蛍光特性に関する研究	【蛍光分光光度計】HORIBA SPEX Fluorolog 3-21, 【可視紫外分光光度計】Hitachi U-3500
8	前期	東京理科大学 理学部第二部	准教授	秋津　貴城	アゾ金属錯体の円偏光紫外光誘起キラル秩序のCD分光	【円二色性分散計】JASCO J-720WI
9	前期	名古屋工業大学 工学研究科	准教授	小野　克彦	新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
10	前期	神戸大学 自然科学系 先端融合研究	助教	木村　行宏	紅色光合成細菌由来光捕集膜蛋白質複合体における耐熱化の分子機構	【熱分析装置】MicroCal iTC200
11	前期	農業・食品産業技術 総合研究機構 畜産草地研究所	主任研究員	横山　浩	バイオマス利用に向けた糖化関連タンパク質の解析	【熱分析装置】MicroCal iTC200
12	前期	室蘭工業大学 大学院工学研究科	助教	馬渡　康輝	側鎖に分岐アルキル基を有するπ共役系ラセン高分子の溶媒及び温度に対する光学特性	【円二色性分散計】JASCO J-720WI
13	前期	京都大学 大学院医学研究科	助教	野村　紀通	哺乳類トランスポーター蛋白質と基質・阻害剤の分子間相互作用の解析	【熱分析装置】MicroCal iTC200
14	前期	兵庫県立大学 大学院物質理学研究科	助教	満身　稔	一次元ロジウム-ジオキソレン錯体の結晶構造解析２	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
15	前期	神戸大学 大学院理学研究科	准教授	高橋　一志	協同転移を示す複合機能錯体の低温構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3

整理番号	申請区分	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
16	前期	九州大学 稲盛フロンティア研究センター	特任助教	石元　孝佳	ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定	【ピコ秒レーザー】Millennia-Tsunami, TITAN-TOPAS, 【ナノ秒レーザー】エキシマー励起色素レーザー／Compex110F,LPD3002

【後期】

整理番号	所　属	職　名	提案代表者	研究課題	利用研究設備
1	自然科学研究機構 核融合科学研究所	准教授	高山　定次	エネルギー有効利用のためのアニオンドープ酸化物－有機物ナノコンポジットの可能性研究	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-LA500
2	名古屋工業大学 大学院物質工学専攻	准教授	濱中　泰	サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の光学特性の研究	【ナノ秒レーザー】フッ素系エキシマーレーザー／Lambda Physik Compex110F, 【円二色性分散計】JASCO J-720WI
3	豊橋技術科学大学 環境・生命工学系	助手	藤沢　郁英	X線結晶構造解析による分子構造の決定	【単結晶X線回折装置】*1
4	名古屋工業大学 工学研究科	准教授	小野　克彦	新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用	【単結晶X線回折装置】*1, 【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3, 【粉末X線回折装置】Rigaku RINT-UltimaII
5	茨城大学 理学部	教授	大友　征宇	紅色光合成細菌の光捕集膜タンパク質複合体における耐熱化の分子機構	【熱分析装置】 MicroCal iTC200, MicroCal VP-DSC
6	奈良女子大学 自然科学系研究院	教授	飯田　雅康	キレート型プロトン性イオン液体中での錯形成と構成成分の拡散	【核磁気共鳴装置】 JEOL JNM-ECA600
7	兵庫県立大学 大学院物質理学研究科	助教	満身　稔	多孔性ポルフィリン亜鉛錯体の結晶構造解析	【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
8	岐阜大学 工学部	助教	三輪　洋平	イオン性ブロック共重合体の熱分析	【熱分析装置】*2
9	神戸大学 農学研究科	助教	木村　行宏	光合成膜蛋白質耐熱化の熱力学的解析	【熱分析装置】MicroCal iTC200
10	日本大学 生物資源科学部	助教	高野　英晃	新規な光センサータンパク質の生化学的解析	【熱分析装置】MicroCal iTC200
11	名城大学 農学部	契約研究員	平松　孝章	BEDT-TTF銀錯体の極低温構造解析	【単結晶X線回折装置】 微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3
12	岡山大学 大学院自然科学研究科	講師	押木　俊之	183W核磁気共鳴法によるタングステン錯体の構造研究	【核磁気共鳴装置】JEOL JNM-LA500
13	神戸大学 大学院理学研究科	准教授	高橋　一志	金属間結合形成転移を示す機能性金属錯体の構造解析	【単結晶X線回折装置】微小結晶／Rigaku MERCURY CCD-3

【機器の表記について】

◎【単結晶X線回折装置】*1　：　Rigaku MERCURY CCD-1　または　CCD-2

◎【熱分析装置】*2　：　TA Instruments TGA2950 または SDT2960 または DSC2920

平成24年度設備利用状況

1．ナノテクノロジープラットフォーム事業対応設備

1．1　支援毎の利用実績

支援名		所外利用												所内利用			
		協力研究		施設利用		技術代行		小計		技術相談		合計		所内		総計	
		件数	日数	件数	日数	件数	日数	件数	日数	件数	日数	件数	日数	件数	日数	件数	日数
電子顕微鏡支援	高分解能透過分析電子顕微鏡支援	1	2	8	63	0	0	9	65	0	0	9	65	9	34	18	99
	集束イオンビーム加工と走査電子顕微鏡支援	1	12	6	96	0	0	7	108	0	0	7	108	17	69	24	177
超高磁場NMR支援	920MHz NMR支援	4	80	8	207	0	0	12	287	14	32	26	319	11	77	37	396
分子物性支援	X線光電子分光支援	0	0	3	16	0	0	3	16	0	0	3	16	5	26	8	42
	電子スピン共鳴支援	0	0	9	35	0	0	9	35	0	0	9	35	3	19	12	54
	顕微ラマン分光/SQUID支援	0	0	15	103	0	0	15	103	0	0	15	103	4	11	19	114
	FT遠赤外分光支援	0	0	1	3	0	0	1	3	0	0	1	3	1	2	2	5

1．2　装置毎の外部共用率・民間利用割合

設備群	仕様	実稼働日数	自主運用日数	共用利用日数	民間利用日数	外部共用率	民間割合	設備の登録・削除日
電子顕微鏡	分析型透過電子顕微鏡	132	34	65	0	49%	0%	2012/7/1登録
	電界放射走査電子顕微鏡 集束イオンビーム加工機	177	69	108	43	61%	40%	2012/7/1登録
分子物性	X線光電子分光	149	26	16	0	11%	0%	2012/7/1登録
	電子スピン共鳴	146	19	35	0	24%	0%	2012/7/1登録
	顕微Raman/FT遠赤外/SQUID	149	13	106	0	71%	0%	2012/7/1登録
超高磁場NMR	日本電子社製JMN-ECA920	364	77	287	0	79%	0%	2012/7/1登録

2．それ以外の設備

(2012.4.1～2013.3.31)

機器名	利用グループ数			利用件数		
	施設利用	所内利用	合計	施設利用	所内利用	合計
電子スピン共鳴装置						
EMX Plus	12	5	17	47	34	81
E500	10	5	15	62	47	109
単結晶X線回折装置						
MERCURY-CCD-1	9	5	14	44	20	64
MERCURY-CCD-2	7	0	7	16	0	16
MERCURY-CCD-3	12	2	14	31	8	39
粉末X線回折装置						
RINT-UltimaII	3	8	11	18	350	368
熱分析装置						
VP-DSC	2	2	4	2	12	14
iTC200	3	2	5	3	43	46
TGA2950/ DSC2920/ SDT2960	5	1	6	23	18	41
マトリックス支援レーザー脱離イオン化-飛行時間型質量分析計						
Voyager DE-STR	1	11	12	7	813	820
有機微量元素分析装置						
MICRO CORDER JM10	／	9	9	／	181	181
蛍光X線分析装置						
JSX-3400RII	／	2	2	／	38	38
核磁気共鳴装置						
JNM-ECA600	1	3	4	2	91	93
JNM-LA500	3	9	12	9	940	949
JNM-ECS400	／	9	9	／	3505	3505
ピコ秒レーザー						
Millennia-Tsunami,TITAN-TOPAS	1	1	2	1	13	14
ナノ秒レーザー						
エキシマー励起色素レーザー	1	1	2	1	31	32
Nd:YAG励起OPOレーザー	1	2	3	2	101	103
フッ素系エキシマーレーザー	1	1	2	1	30	31
蛍光分光光度計						
SPEX Fluorolog3-21	4	2	6	14	8	22
円二色性分散計						
J-720WI	1	4	5	5	19	24
可視紫外分光光度計						
U-3500	4	2	6	13	13	26
超伝導磁石付希釈冷凍機						
Kelvinox 400	／	0	0	／	0	0

低温冷媒供給設備	供給量		
	液体ヘリウム（L）	液体窒素（L）	窒素ガス（㎥）
明大寺地区	43258.0	25613.0	／
山手地区	11014.0	33476.9	821.0

平成25年度設備利用状況

1．ナノテクノロジープラットフォーム事業対応設備

1．1　支援毎の利用実績

支援名		所外利用 協力研究・施設利用 件数	所外利用 協力研究・施設利用 日数	所外利用 技術代行 件数	所外利用 技術代行 日数	所外利用 小計 件数	所外利用 小計 日数	所外利用 利用日数（重複なし） A1．民間公開	所外利用 利用日数（重複なし） A2．大学等	所内利用 件数	所内利用 日数	成果非公開 件数	成果非公開 日数	成果非公開 利用日数（重複なし） C．所内、非公開民間	総計 件数	総計 日数	総計 E．実稼動日数(=A1+A2+C)	所外利用 技術相談 件数	所外利用 技術相談 日数	成果非公開 技術相談 件数	成果非公開 技術相談 日数
電子顕微鏡	高分解能透過型電子顕微鏡(TEM)	8	77	0	0	8	77	0	77	4	30	0	0	30	12	107	107	0	0	0	0
	電界放射走査電子顕微鏡(SEM)	6	99	1	4	7	103	0	97	5	47	1	2	39	13	152	136	0	0	0	0
	集束イオンビーム加工機(FIB)	3	51	1	2	4	53	0	53	1	1	0	0	1	5	54	54	0	0	0	0
電子分光	X 線光電子分光(ESCA)	2	4	0	0	2	4	0	4	3	28	0	0	28	5	32	32	0	0	0	0
電子スピン共鳴	電子スピン共鳴 Bruker 社製 E-680	6	80	0	0	6	80	0	68	1	6	0	0	6	7	86	74	2	2	0	0
	電子スピン共鳴 Bruker 社製 EMX	14	69	0	0	14	69	0	68	1	4	0	0	4	15	73	72				
	電子スピン共鳴 Bruker 社製 E500	12	121	0	0	12	121	0	121	3	10	0	0	10	15	131	131				
SQUID	SQUID　QuantumDesign 社製 MP MS-7	14	231	0	0	14	231	0	213	9	58	0	0	50	23	289	263	2	2	0	0
	SQUID　QuantumDesign 社製 MP MS-XL7	13	228	0	0	13	228	0	205	5	40	0	0	30	18	268	235				
振動分光	顕微ラマン分光	12	117	0	0	12	117	0	116	3	15	1	5	17	16	137	133	1	2	1	14
	FT 遠赤外分光	2	4	0	0	2	4	0	0	2	3	0	0	3	4	7	3	2	4	0	0
高磁場 NMR	1H 920MHz (21.6T)、溶液・固体	8	250	0	0	8	250	0	237	3	17	0	0	17	11	267	254	0	0	0	0
	1H 800MHz。Bruker AVANCE 800US。溶液	7	213	0	0	7	213	0	193	6	113	0	0	63	13	326	256	2	3	0	0
	1H 600MHz。Bruker AVANCE 600。固体	3	103	0	0	3	103	0	103	1	43	0	0	43	4	146	146	3	7	0	0

1．2　装置毎の外部共用率・民間利用割合

設備(設備群)名	仕様	外部共用率(目標)%	左記の外部共用のうち民間企業が占める割合(目標)%	外部共用 学外利用日数(民間企業等) A1	外部共用 学外利用日数(他大学・公的研究機関・その他) A2	外部共用 他部局利用日数 B	大学の自主運用 自主運用日数 C	大学の自主運用 利用可能だったが利用されなかった日数 D	実稼働日数 E (=A1+A2+B+C)	外部共用率(実績)% X (=(A1+A2+B)/E)	左記の外部共用のうち民間企業が占める割合(実績)% (=A1/(A1+A2+B))	備考	設備の登録・削除日
分子物性支援	分析型透過電子顕微鏡 日本電子社製 JEM-3100FEF 300kV, 粒子分解能 0.17nm, EDX, EELS, ミクロトーム	50	20	0	77		30	115	107	0.719626168	0	ナノ支援導入設備。故障につき支援見合わせ中。	
	電界放射走査電子顕微鏡 日本電子社製 JSM-6700F 試料４インチまで、EDS 付	50	20	0	97		39	112	136	0.713235294	0		
	集束イオンビーム加工機 日本電子社製 JEM-9310FIB 試料１インチまで、SEM, TEM 加工可	50	20	0	53		1	165	54	0.981481481	0	ナノ支援導入設備	
	X 線光電子分光 電子分光器 Omicron 社製 EA-125 ツインアノードＸ線源	30	20	0	4		28	187	32	0.125	0		
	電子スピン共鳴 Bruker 社製 E-680 W-band 94GHz　ハイブリッド磁石 (超伝導 6T, 常伝導 3.5T)、 3.8-300K Q-band パルス ENDOR & ELDOR X-band パルス ENDOR	50	20	0	68		6	125	74	0.918918919	0		
	電子スピン共鳴 Bruker 社製 EMX　X-band　CW のみ	50	20	0	68		4	167	72	0.944444444	0		
	電子スピン共鳴 Bruker 社製 E500　X-band　CW のみ	50	20	0	121		10	123	131	0.923664122	0		EMX, E500 は 2013 年 4 月 1 日より公開
	SQUID QuantumDesign 社製 MP MS-7 ±7T, 2-400K, 300-800K, DC	50	20	0	213		50	40	263	0.809885932	0		
	SQUID QuantumDesign 社製 MP MS-XL7 ±7T, 2-400K, DC & AC	50	20	0	205		30	62	235	0.872340426	0		
	顕微ラマン分光 RENISHAW inVia Reflex 488,532,633,785nm 100-3200cm^{-1}　分解能：面内 1 μm, 深度 2 μm　3.2-500 K	30	20	0	116		17	120	133	0.872180451	0		2013 年 4 月 1 日より公開
	FT 遠赤外分光 Bruker 社製 IFS66v　10-15000cm^{-1}	30	20	0	0		3	273	3	0	0		2013 年 4 月 1 日より公開
超高磁場 NMR 支援	日本電子社製 JMN-ECA920 1H 920MHz (21.6T)、溶液・固体	50	20	0	237		17	41	254	0.933070866	0	ナノ支援関連補正導入設備	
	1H 800MHz。Bruker AVANCE 800US。 溶液、クライオプローブ	30	10	0	193		63	58	256	0.75390625	0		H25.4.1 登録(準備中)
	1H 600MHz。Bruker AVANCE 600。 固体	30	10	0	103		43	11	146	0.705479452	0		H25.4.1 登録(準備中)

2. それ以外の設備

(2013.4.1～2014.3.31)

機器名	利用グループ数			利用件数		
	施設利用	所内利用	合計	施設利用	所内利用	合計
単結晶X線回折装置						
MERCURY-CCD-1	8	3	11	33	4	37
MERCURY-CCD-2	5	1	6	15	1	16
MERCURY-CCD-3	14	4	18	34	10	44
粉末X線回折装置						
RINT-UltimaII	1	6	7	5	480	485
熱分析装置						
VP-DSC	1	1	2	1	3	4
iTC200	4	2	6	8	39	47
TGA2950/ DSC2920/ SDT2960	1	0	1	3	0	3
マトリックス支援レーザー脱離イオン化-飛行時間型質量分析計						
Voyager DE-STR	1	8	9	5	788	793
有機微量元素分析装置						
MICRO CORDER JM10		9	9		218	218
蛍光X線分析装置						
JSX-3400RII		1	1		2	2
核磁気共鳴装置						
JNM-ECA600	3	3	6	5	83	88
JNM-LA500	3	6	9	7	528	535
JNM-ECS400		6	6		3291	3291
ピコ秒レーザー						
Millennia-Tsunami,TITAN-TOPAS	1	1	2	8	31	39
ナノ秒レーザー						
エキシマー励起色素レーザー	1	1	2	2	19	21
Nd:YAG励起OPOレーザー	0	1	1	0	39	39
フッ素系エキシマーレーザー	0	1	1	0	5	5
蛍光分光光度計						
SPEX Fluorolog3-21	4	0	4	21	0	21
円二色性分散計						
J-720WI	2	6	8	7	45	52
可視紫外分光光度計						
U-3500	5	5	10	13	18	31
超伝導磁石付希釈冷凍機						
Kelvinox 400		0	0		0	0

低温冷媒供給設備	供給量		
	液体ヘリウム（L）	液体窒素（L）	窒素ガス（㎥）
明大寺地区	42355.0	23336.0	
山手地区	14072.0	28697.0	1609.0

平成 25 年度（通年）

分子内電荷移動錯体の結晶構造解析による分子配列の解明と分子間相互作用の解明

静岡大学 工学部・教授　　植田　一正

【研究目的】

色素増感太陽電池用色素の開発の途上、前駆体の中にこれまで得られた誘導体とは異なる色調の単結晶を与えるものを見出した。この固体は可視光をほとんど吸収するので、固体の色調と分子配列との相関を明らかにすることは、色素開発に新たな知見を与えると期待される。相関を明らかにするためには、単結晶構造解析による分子構造と結晶構造の解明、さらに、隣接分子間の重なり積分の見積もりが必要となる。そこで、本研究では、単結晶構造解析と隣接分子間の重なり積分の計算を行ったので報告する。

【利用手段・方法】

色調の異なる誘導体 1a と比較化合物 1b の合成と単結晶の作製は静岡大学で行った。これらの単結晶構造解析には、機器センター付設の Rigaku MERCURY CCD-1、Rigaku MERCURY CCD-2 および Rigaku MERCURY CCD-3 を用いた。重なり積分の計算は静岡大学で行った。

【結果と考察】

1a、1b の単結晶構造解析より、次のことが明らかとなった。結晶中 1a 分子は head-to-head 型に積層し、*a* 軸方向に一次元カラム構造を形成していた。さらに、カラム内では、積層している分子の長軸が互いに 39 度の角度をなしており、結果として、メトキシカルボニル基の置換したジチアシクロペンテン環の硫黄原子周辺同士と中央のチアシクロペンテン環とチオカルボニル基との重なりのみが存在した。一方 1b では、分子は *a* 軸方向に head-to-tail 型に積層し、一次元カラム構造を形成していた。カラム内ではジチアシクロペンテン環上に隣接する分子の二重結合が接近するように積層し、2 つの隣接分子の長軸のなす角度はほぼ 180 度であった。

重なり積分の計算より、次のことが明らかとなった。1a のカラム内では、分子の積層方向に沿った均一な相互作用が存在し、さらにカラム間には弱い相互作用が存在した。一方、1b のカラム内では、二分子間に強い相互作用が存在して二量化しており、二量体間に二量体内のものより弱い相互作用が存在した。カラム間にはほとんど相互作用は存在しなかった。

結晶構造解析と重なり積分の計算結果より、固体の色調の大きな変化は、分子配列に起因する分子間相互作用の違いによることが明らかとなった。

【参考文献】

学会発表

“メトキシカルボニル置換 2,5-ジ(1,3-ジチオール-2-イリデン)-1,3-ジチオラン-4-チオン誘導体の合成と固体での光物性,” 植田　一正・草薙　弘樹・南保　宏貴・河野　芳海・宮林　恵子・江上　智恵, 日本化学会第 94 春季年会(2014), 2014 年 3 月 27 日～30 日, 名古屋大学（愛知県).

平成 25 年度（通年）

シクロデキストリン類と低分子薬物の包接複合体結晶の単結晶 X 線構造解析

愛知学院大学・助教　　小川　法子

【研究目的】

シクロデキストリン（CD)類はD-glucoseが環状に結合した環状糖類であり、疎水性の空洞を有する。この空洞に薬物を取り込む(包接する)ことで、薬物の安定性を向上したり、溶解性を改善したりすることができるなど、薬物を CD 類に包接することで得られる利点は多い。包接複合体における薬物と CD 類との相互作用メカニズムの解明の手法としては、CD 類と薬物の化学量論比、構造を複数の機器分析により類推することが一般的である。本研究では、複合体における CD 類と薬物の化学量論比、構造ならびに包接メカニズムを明らかにすることを目的として「単結晶 X 線回折装置を用いた CD 類の薬物包接複合体の結晶構造を解析」を試みた。

【利用手段・方法】

CD 類と薬物の包接複合体結晶は所属機関にて作製を行った。単結晶を作製した後、分子科学研究所に持参し、単結晶 X 線回折装置にて回折パターンを測定し構造解析を行った。単結晶 X 線回折装置としては、Rigaku MERCURY CCD-1・R-AXIS IV 及び Rigaku MERCURY CCD-2、また、微小結晶 Rigaku MERCURY CCD-3 を利用した。結晶を顕微鏡にて確認し、クライオループにて装置に設置し、窒素噴霧低温下で測定を行った。解析はSHELXを内蔵した結晶構造解析ソフトである Yadokari-XG 2009 [1, 2] を用いて行った。

【結果と考察】

CD 類(それぞれ glucose 単位 6, 7, 8 より構成されるα-, β-, γ-CD)と化合物の組み合わせが異なる数種類の結晶について測定を試み、初期構造を決定することができたα-CD と R(+)-αリポ酸の複合体結晶に関して、シンポジウムで発表した [3]。本研究による単結晶 X 線構造解析の結果、α-CD は R(+)-αリポ酸と包接複合体を形成することが確認できた。結晶構造において、分子運動の目安となる温度因子（熱振動パラメーター）は、CDに比べて包接されたゲスト分子が一般に大きく、ゲスト分子はdisorderで存在することが多い [4]。本結晶の構造解析においても、包接された R(+)-αリポ酸の温度因子が大きいことから、R(+)-αリポ酸の分子運動が大きく disorder で存在することが推察され、今後も検討を進めていく予定である [3]。

【参考文献】

1) 脇田啓二, Yadokari-XG, 単結晶構造解析ソフトウェア（2001).

2) 甲千寿子, 秋根茂久, 根本隆, 權垠 Yadokari-XG 2009, 日本結晶学会誌, **51**, 218-224 (2009).

3) 小川法子, 瀬藤敬太, 生田直子, 上梶友記子, 中田大介, 寺尾啓二, 川島嘉明, 山本浩充, R-αリポ酸とα-シクロデキストリンの包接複合体の単結晶 X 線構造解析, 第 30 回シクロデキストリンシンポジウム, 熊本, 2013 年 9 月 12 日

4) 原田一明, シクロデキストリン超分子の構造化学, アイピーシー（2000).

平成 25 年度（前期）

シアニン J 会合体の蛍光特性に関する研究

早稲田大学・准教授　　井村　考平

【研究目的】

有機色素 J 会合体は、会合体の幾何構造や会合体内部での分子配向により光学特性が大きく変化する。J 会合体の分光特性を理解するためには、会合体の形状と光学像の同時測定が不可欠である。本課題では、シアニン系色素である bis (3-sulfopropyl)-5,5',6,6'-tetrachloro-11'-dioctylbenzimidacarbocyanine (C8S3) を用いてチューブ状の J 会合体を合成し、近接場光学顕微鏡による蛍光と吸収分光測定により J 会合体の分光特性の解明を目的とした。

【利用手段・方法】

J 会合体を顕微分光評価することが本研究の最終目的であるが、そのためには、まず合成した J 会合体の分光特性が既報と一致し、その幾何構造がチューブ状であることを確認する必要がある。チューブ状 C8S3 J 会合体は、チューブ内壁と外壁に励起される J バンドがスペクトル上に近接して現れることが報告されている[1]。したがって、これら二つの J バンドをスペクトル分離して測定されれば、合成した J 会合体がチューブ状であると確認できる。汎用の蛍光分光光度計では、スペクトル分解能が低いために二つのピークが重なり合い、これらを分離することが困難である。本課題では、高分解能でのスペクトル計測が可能な蛍光分光光度計（HORIBA SPEX Fluorolog 3-21, 施設利用公開装置）を用いて試料の発光計測を行い、合成した試料の評価を行った。また、吸収特性についても同時に評価するために、可視紫外分光光度計（Hitachi U-3500, 施設利用公開装置）を用いた計測を行った。

【結果と考察】

図 1（a,b）に合成した試料溶液の吸収スペクトルと発光スペクトルをそれぞれ示す。吸収スペクトルには、590 nm および 600 nm 近傍に鋭いピークが観測される。これらはそれぞれチューブ外壁と内壁に励起される J バンドに帰属される。高分解能での蛍光測定（励起波長：532 nm）を行った結果、蛍光スペクトルにも 590 nm および 600 nm 近傍に二つのピークが確認された。これらの測定結果は、合成した試料がチューブ状の J 会合体であることを示す。

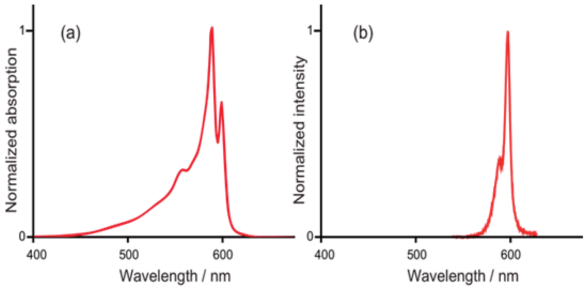


図 1． C8S3 J 会合体溶液の（a）吸収スペクトルと（b）蛍光スペクトル．励起波長 532 nm.

さらに J 会合体の光学特性を詳細に究明するために、試料をガラス基板上に分散させ近接場光学顕微鏡を用いてその分光特性を評価した。近接場分光スペクトルでは二つのピークを分離して検出することができないものの、二つのピーク成分が存在することを確認することができる。また、J 会合体の幾何構造と偏光特性の相関も明らかとなり、チューブ状 J 会合体の光学特性と会合体内部の分子配向に関する新たな知見を得ることに成功した。以上の成果は、分子科学討論会において発表した[2]。また、現在論文投稿の準備を進めている。

【参考文献】

[1] H. von Berlepsch, S. Kirstein, R. Hania, A. Pugzlys, C. Böttcher, *J. Phys. Chem. B*, 111, 1701 (2007).
[2] 牧田賢彦, 井村考平, チューブ状シアニン J 会合体の近接場顕微分光, 第 7 回分子科学討論会　ポスター発表（京都テルサ, 9 月 25 日）.

平成 25 年度（前期）

アゾ金属錯体の円偏光紫外光誘起キラル秩序の CD 分光

東京理科大学 理学部第二部化学科・准教授　　秋津　貴城

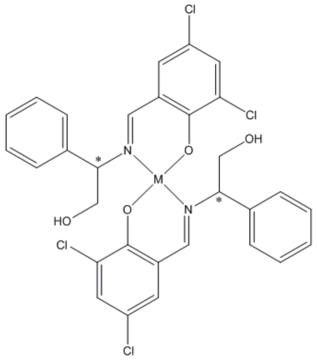
【研究目的】

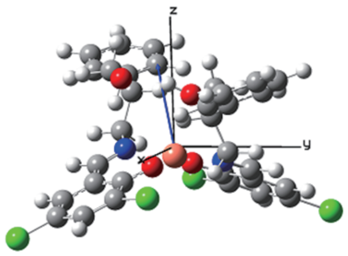
これまでに金属酵素活性中心モデルや分子磁性体などの磁性クラスター金属錯体を合成し物性を研究しており、錯体自体のバルク磁性と、分散させた高分子キャスト・フィルムとしての有機—無機複合材料の合成、同定・物性測定（IR スペクトル、電子スペクトル、CD スペクトルなど）、可視光・紫外光照射に伴う色素の光異性化と高分子ソフトマター膜中の秩序形成挙動の確認などを行っている。種々の置換基を有するキラルシッフ塩基 Co(Ⅱ), Cu(Ⅱ), Ni(Ⅱ), Zn(Ⅱ)錯体とアゾベンゼンを別々に含むメタクリル酸メチルポリマー(PMMA)キャスト膜の有機-無機複合材料を創製し、直線偏光紫外光照射後の分子配向の異方性（光学的な二色性）の増大を偏光電子スペクトルや偏光 IR スペクトルで観測してきた。

そこで本研究期間では、有機-無機複合材料に加えられる外場である紫外光の偏光状態を従来の直線偏光（ワイゲルト効果で直線的に配向した秩序誘起が期待される）から、UVSOR を用いた円偏光（らせん配列に配向してキラリティーを示す秩序が期待される）への拡張に着手して、研究の展開を図った。

【利用手段・方法】

円偏光紫外光照射後のキラル秩序の誘起をする際、マトリックスである PMMA ポリマーとの分子間相互作用や $\pi-\pi$ 相互作用が水素結合で強くなり秩序の保持で有利と予想される分子設計となることを念頭に置き、新規にアゾベンゼン基や(*R*)-(+)-β-メチルフェネチルアミン部位を分子構造中に含むキラルシッフ塩基配位子を有する Cu(Ⅱ),Ni(Ⅱ),Zn(Ⅱ)錯体の PMMA キャストフィルム、ならびに、アゾベンゼン分子とキラルアルコールアミンをビルディング・ブロックとするキラルシッフ塩基配位子を有する Cu(Ⅱ),Ni(Ⅱ),Zn(Ⅱ)錯体の PMMA キャストフィルムの、合計 6 種類の有機無機複合材料を合成して、分子構造やアゾベンゼン部位の比較を目的として、円偏光 UV 光照射直後の CD スペクトル（JASCO J-720WI。220-800nm 程度。室温測定）の変化により、期待される分子配列が形成されるか検討した。

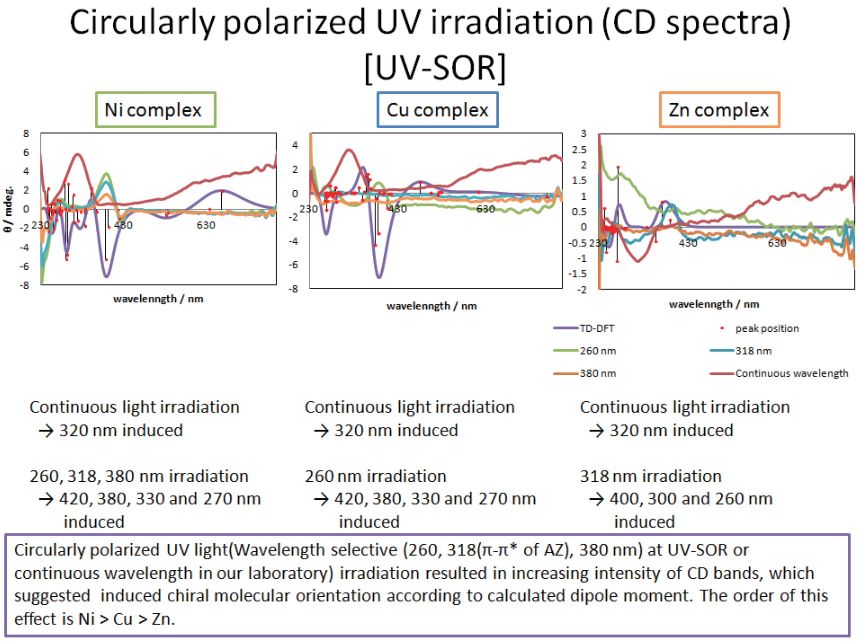




【結果と考察】

UVSOR BL-1U（$\lambda/4$ 板使用）で円偏光をつくり、今回は、318 nm、260 nm 及び 380 nm に波長を合わせて、3 分、5 分及び 8 分間、それぞれの材料に照射した。これを CD 装置（JASCO J-720WI）で、800-200nm, 3 回積算, 200 nm/min の測定条件で測定した。ブランク・データ（空気）を差し引い

た偏光照射後 CD からブランク・データ（空気）を差し引いた偏光照射前 CD を差し引き、円偏光紫外光照射前後の CD スペクトルの変化を求めたところ、いずれの中心金属及び、配位子（アゾベンゼン複合様式）でも、顕著な CD スペクトルの増大を示した。これは、実験室系光源で 350 nm 以下の連続波長光を「紫外光」として同様の実験を行った際、Cu(Ⅱ),Ni(Ⅱ),Zn(Ⅱ)錯体のいずれでも、320 nm 付近に CD スペクトルの増大が見られたことと異なり、UVSOR の波長幅の狭い光源では、それぞれ異なる波長領域に吸収がみられ、波長選択的にキラル秩序の誘起が引き起こされるという、放射光ならではの新しい知見を得られたことが示唆される。



【参考文献】

学会発表

・石田尚也、小湊千種、秋津貴城、許斐太郎、加藤政博,含アゾ基キラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II),Zn(II)錯体複合材料の波長選択 UV 円偏光誘起分子配向と TD-DFT による解釈,スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」, 2014 年 1 月

・小湊千種、石田尚也、秋津貴城、許斐太郎、加藤政博,アゾベンゼンとキラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体複合系の波長選択 UV 円偏光誘起分子配向と TD-DFT による解釈,スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」, 2014 年 1 月

・石田尚也、秋津貴城, 含アゾ基キラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体の直線・円偏光誘起分子配向, 錯体化学会第 63 回討論会, 2014 年 11 月

・小湊千種、秋津貴城, アゾベンゼンとキラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体複合材料の偏光誘起分子配向と双極子モーメント, 錯体化学会第 63 回討論会, 2014 年 11 月

・須永将光・古谷昌平・伊藤舞子・小湊千種・秋津貴城, キラルシッフ塩基 Co(II)錯体とアゾ色素複合系の円偏光照射によるキラル秩序形成の解釈, 第 3 回 CSJ 化学フェスタ, 2013 年 10 月

・C. Kominato, T. Akitsu, Photoinduced molecular orientation of catalytic-like chiral Schiff base metal complexes having azo-groups in polymer and metalloprotein (laccase) matrices, International Conference on BioInorganic Chemistry ICBIC 16, 2013 年 7 月

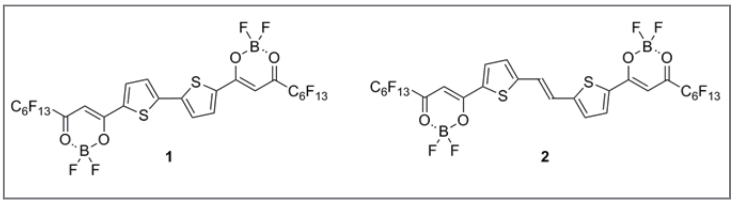
平成 25 年度（前期）

新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用

名古屋工業大学・准教授　　小野　克彦

【研究目的】

近年、有機半導体の研究開発が活発に行われている。特に、p 型半導体と比較して材料のバリエーションが少ない n 型半導体において、さまざまな分子が開発されている。我々は、オリゴチオフェンなどの有機π電子系にホウ素キレートを置換して分極構造を誘起させると、高い電子受容能が発現することを見出した。この結果、化合物 1 において良好な n 型半導体特性が観測された（移動度：2.0×10^{-3} cm^{-1} V^{-1} s^{-1}, on/off: 1.0×10^{6}）[1]。この研究手法は簡便なため、n 型半導体の開発に有効である。本研究では、さらなる特性向上を目指し、ビニレン基（$-CH_2=CH_2-$）で架橋した化合物 2 の合成研究を行った。



【利用手段・方法】

有機半導体の研究では、分子科学的視点からの材料開発が極めて重要である。分子単独の性質に加えて、これらが形成する集合構造によってデバイス特性が大きく変化する。このため、当研究室では X 線構造解析のプロフェッショナルである戸村正章助教（安全衛生管理室）と共同研究を行い、分子集合体の構造とデバイス特性の相関を調べながら進めている。本期間では、単結晶 X 線回折装置を用いて化合物 2 の結晶構造を調査した。

【結果と考察】

分子構造は、ホウ素キレートを含むπ電子系が平面であり、フルオロアルキル側鎖がπ平面から斜めに突き出した構造であった（図 1a）。化合物 1 と酷似しているが、ビニレン基の導入により B…B 間の距離は 1.7 Å だけ拡張していた。結晶構造はπ平面と側鎖が交互に積層した構造を形成していた（図 1b）。トランジスタ基板上でこうした集合構造が構築できれば、π平面が媒体となってソース－ドレイン電極間の横軸方向へ電子を流すことができる。現在、化合物 2 のトランジスタ応答を測定しており、π共役系の拡張が電子移動度に及ぼす影響を調査している。

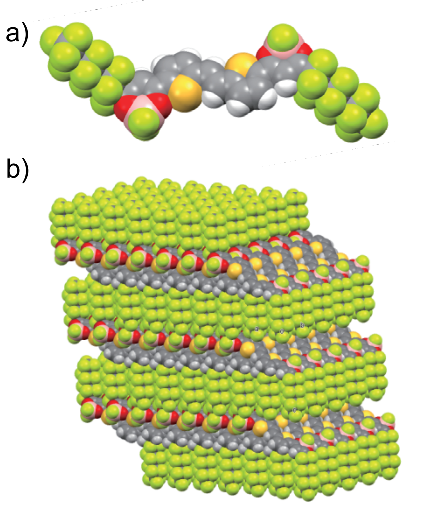


図 1. 化合物 2 の a)分子構造と b)結晶構造

【参考文献】

[1] K. Ono, A. Nakashima, Y. Tsuji, T. Kinoshita, M. Tomura, J. Nishida, Y. Yamashita, *Chem.–Eur. J.* 2010, *16*, 13539–13546.

[2] 依斯拉木 依力哈木, 戸村 正章, 小野 克彦 「拡張型ビチオフェン誘導体のホウ素キレートによる機能化と物性調査」第 24 回基礎有機化学討論会, 2013 年 9 月 6 日, 東京.

平成 25 年度（前期）

側鎖に分岐アルキル基を有するπ共役系ラセン高分子の溶媒及び温度に対する光学特性

室蘭工業大学大学院 工学研究科・助教　　馬渡　康輝

【研究目的】

側鎖に分岐アルキル基を有するπ共役系らせん高分子を詳細に解析することで、らせんの巻き方向また動的変化のメカニズム等を明らかにすることを目的とする。本研究の成果は、らせん高分子の構造解析の基礎となるばかりでなく、らせん分子の分子構造や分子運動の制御法を確立する上で非常に重要である。

【利用手段・方法】

利用した機器：
円二色分散計、ペルチェ式恒温装置（昇温測定用）、クライオスタット（降温測定用）

π共役らせん分子の溶液中における構造変化を解明するため、当研究室で合成した種々のらせん高分子を用い、円二色性スペクトルの溶媒依存性及び温度依存性を測定した。

【結果と考察】

側鎖に分岐アルキル基を有するπ共役系らせん高分子の各種溶媒及び温度における円二色性スペクトルを測定し、それらの溶媒依存性($CHCl_3$, CH_2Cl_2, *n*-Hexane)及び温度依存性(30 ℃～-50 ℃)を検討した。その結果、ポリマー合成時に用いるモノマーのエナンチオマー過剰率の違いや、測定温度によって、スペクトルの強度および波形に違いが出ることが明らかになった。現在、同様の温度で測定した紫外可視吸収スペクトルおよび NMR スペクトルと総合して、らせん分子の運動及び構造に関する詳細な解析を進めている。

【参考文献】

論　文
Y. Yoshida, Y. Mawatari, M. Tabata, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, *135*, 4110.
Y. Yoshida, Y. Mawatari, M. Tabata, et al., *Polym. Chem.*, 2013, *4*, 2982.

学会発表
吉田嘉晃・元茂朝日・元茂蘭子・佐々木隆浩・馬渡康輝・田畑昌祥
第 62 回高分子討論会予稿集（*Polymer Preprints, Japan* Vol. 62, No. 2, 2013, page 3349）

平成25年度（前期）

ベンゼン重水素置換体の分子構造精密決定

九州大学 稲盛フロンティア研究センター・特任助教　　石元　孝佳

【研究目的】

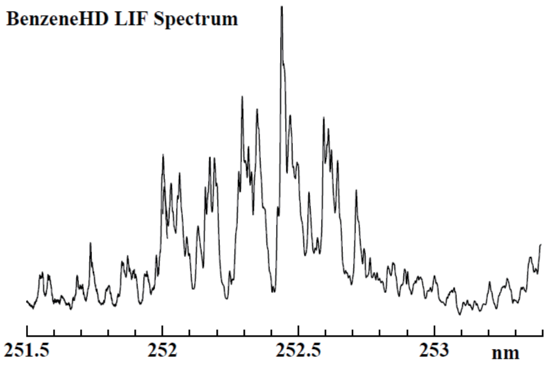
ベンゼン(C_6H_6)には重水素置換の数や位置によって12種類の同位体が存在するが、そのすべてについて超音速ジェットと波長可変パルスレーザーを用いて高分解能スペクトルの測定を目的とした。その測定結果を詳細に解析することで、振動エネルギー構造を明らかにし、励起分子ダイナミクスについてその機構を検討した。

【利用手段・方法】

今回の施設利用では、高温パルスノズルを用いて超音速ジェット中の冷却孤立ベンゼン分子を生成し、0.2cm^{-1}のエネルギー分解能の蛍光励起スペクトルを正確に測定した。光源には大学連携研究設備ネットワークによって機器センターで利用できるエキシマ-励起の波長色素レーザーを用いた。

【結果と考察】

C_6H_6と重水素置換体であるC_6D_6を混合して高温加熱すると、HとDの交換反応が進行し、C_6H_6を含めて13種類のベンゼン重水素置換同位体の混合物を作ることが出来る。今回はこの試料のけい光励起スペクトルを正確に測定し同位体の振電バンドを帰属することが出来た。実験データに基づき、ベンゼン分子の分子構造を正確に決定したところ、C_6H_6とベンゼン重水素置換体にはC–HおよびC–D結合長に差は観測されなかった。



一般的にC–HおよびC–D結合長を考えた場合、HおよびDの質量差とポテンシャルの非調和性から、C–H結合長はC–D結合長よりも長くなることが知られている。しかしながら今回の測定結果はベンゼン中のC–HおよびC–D結合長は同一であった。プロトンの量子効果を考慮した最先端の量子化学計算を用いてC_6H_6およびC_6D_6分子の分子構造を計算すると、C–H結合長はC–D結合長よりも約0.005Å程長くなっていた。

今回の超高性能レーザー分光による実験と最先端毛量子化学計算の結果の矛盾点を明らかにするためにも、今後も継続して施設利用を申請し、研究を発展させたい。

平成 25 年度（後期）

エネルギー有効利用のためのアニオンドープ酸化物
ー有機物ナノコンポジットの可能性研究

核融合科学研究所・准教授　　高山　定次

【研究目的】

異種粒子接点に局部的に作用するメカノケミカル反応とおよびマイクロ波照射の効果を比較・重畳させることにより、有機物ナノコンポジットの新規な調製方法を開発すると共に、そのメカニズムを追究する。機械的なエネルギーと電磁界のエネルギーを組み合わせることで、これまでにない有機物ナノコンポジットの製造が期待できる。その結果を踏まえ、マイクロ波照射とメカノケミカル反応を組み合わせたハイブリットプロセスの開発を目指す。

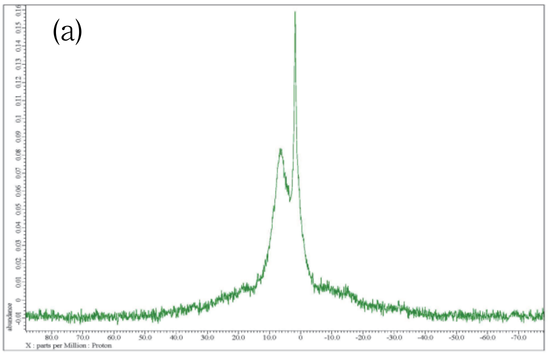
【利用手段・方法】

メカノケミカル反応プロセスでは、SnO_2の酸化物微粒子とPVdFのフッ素含有ポリマー粒子の場合、SnO_2 と PVdF の接点でポリマーの部分分解と酸化物表面の非晶質化が起こり、酸素イオンとフッ素イオンの置換が起こる [1)]。反応後の試料は加熱処理して残留有機物処理を行う必要がある。そこで、マイクロ波と赤外線加熱が結晶構造や化学結合に及ぼす影響について検証するために、JEOL JNM-ECA600で^{1}H, ^{13}C, ^{119}SnについてMAS-NMR測定を行った。SnO_2 (Aldrich, -325mesh)に10 mass%のPVdF(Arkema Inc.)を添加した物理混合物をFritsch　P-7遊星ボールミルで1時間混合粉砕した。粉砕前後の資料を、マイクロ波共振器の最大磁場の位置と赤外線加熱炉で空気中、600℃、1時間加熱処理した。

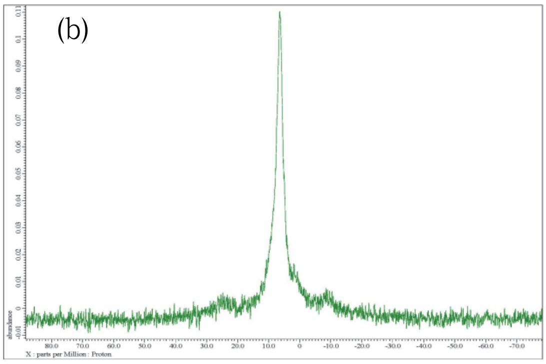
【結果と考察】

^{1}HのNMRスペクトルを図1に示す。マイクロ波加熱処理の試料はピークが一本になっており、プロトンの局所的環境が赤外線加熱と明確な差異があることを見出した。^{119}Snについては、出発原料に比べ、ピーク幅が赤外線加熱、マイクロ波加熱の順番で広くなった。他方、^{13}Cについては残留カーボンの量が少なかったため、十分な強度が取れなかった。

今後は，系統的にマイクロ波処理条件を変化させて得たサンプルに関して、NMR スペクトルなどからミクロな構造変化に関する知見を獲得し、得られたナノコンポジットの新規な特徴に関して詳細に検討する。



(a)赤外線加熱試料



(b)マイクロ波加熱試料

図１　プロトンのNMR測定結果

【参考文献】

1)　M. Senna, E. Turianicova,V. Šepelák, M. Bruns, G. Scholz, S. Lebedkin, C. Kübel, D. Wang, H. Hahn, "Incorporation of fluorine into SnO_2 from polyvinylidene fluoride via its mechanochemical decomposition", Solis State Sci. 2014, 30, 36-43.

平成 25 年度（後期）

サイズ・組成制御した銅カルコゲナイド半導体ナノ粒子の光学特性の研究

名古屋工業大学大学院 工学研究科・准教授　　濱中　泰

【研究目的】

銅カルコゲナイド系の２元、３元、４元化合物半導体のナノ粒子（Cu_xS ナノ粒子、$CuInS_2$ ナノ粒子、Cu_2ZnSnS_4 ナノ粒子）の発光スペクトルと吸収スペクトルを測定し、量子閉じ込め効果や局在プラズモン特性に関する知見を得る。

【利用手段・方法】

蛍光分光光度計　SPEX　Fluorolog3-21

可視紫外分光光度計　U-3500

【結果と考察】

平均粒径 11 nm、4.8 nm、3.7 nm の Cu_2ZnSnS_4 ナノ粒子の吸収スペクトルを測定した。その結果、4.8 nm と 3.7 nm のナノ粒子の吸収端がバルクよりも高エネルギーにシフトしていることがわかった。また、この２つのナノ粒子を比較すると 3.7 nm のものの吸収端が高エネルギーであった。吸収端エネルギーの差は有効質量近似で求めたバンドギャップの変化に近いため、キャリアの量子閉じ込め効果を反映していると考えられる。

Cu_xS ナノ粒子が近赤外光領域に吸収帯を示すとの報告が多数ある。Cu_xS において銅組成を減少（x を 2 から減少）させると正孔がドーピングされると言われている。そのため近赤外領域の吸収帯の起源は高濃度な正孔による局在プラズモン共鳴であるとの説が提唱されている。この点を確認するために、Cu_xS ナノ粒子を有機溶媒に分散させて吸収スペクトルを測定した。その結果、銅組成 x が 2 に近いナノ粒子よりも正孔濃度が高いと考えられる x が 1.8 に近いナノ粒子において近赤外吸収ピークが高振動数に現れることを確認した。また誘電率の異なる溶媒に交換して測定をおこなったところ、溶媒の誘電率が増加するとともに吸収ピークは系統的に低振動数にシフトした。これらの特徴は近赤外吸収帯の起源が局在プラズモン共鳴であるとの解釈を定性的に支持している。

$CuInS_2$ ナノ粒子は高効率な赤色発光を示す半導体量子ドットである。発光スペクトルはブロードであり、欠陥発光と考えられている。しかし、吸収スペクトルもブロードであることから、吸収・発光スペクトル幅には不均一広がりの影響が無視できない。発光励起スペクトルを測定した結果、発光をモニターする波長によって励起スペクトルが顕著にシフトすることがわかった。試料中のナノ粒子サイズの分布、粒子ごとの組成の差がこのような不均一広がりの原因と考えられる。

【参考文献】

1．川瀬正成、小柳津　航、秦　健、濱中　泰、葛谷俊博、「コロイド合成法で作製した Cu_2ZnSnS_4 ナノ粒子の光学特性Ⅲ」、日本物理学会第６９回年次大会、平成２６年３月２９日、東海大学

2．葛谷俊博、小柳津　航、濱中　泰、川瀬正成、「Cu_2ZnSnS_4 ナノ粒子の光学特性の組成依存性」、分子・物質合成プラットフォーム平成２５年度シンポジウム、平成２６年３月１１日、つくば国際会議場

平成 25 年度（後期）

X 線結晶構造解析による分子構造の決定

豊橋技術科学大学 環境･生命工学系・助手　　藤澤　郁英

【研究目的】

本研究では、種々の化合物の新規構造を X 線結晶構造解析で決定することにより、各化合物の理解を深め、分子科学の分野に貢献することを目的としている。今期は環状四量体の新しい包摂化合物結晶の構造決定と、新しく有機合成された化合物の結晶の構造決定を試みた。

【利用手段・方法】

大学で結晶を調製し、単結晶 X 線回折装置（Rigaku 社製 Mercury CCD-1, CCD-2)を施設利用により、9/18, 10/23, 10/30, 11/15, 11/18 の 5 日使用した。CCD カメラで回折点の位置と強度を測定し、デンシトメトリーには Rigaku の CrystalClear を使用した。回折データは大学に持ち帰り、解析プログラムを用いて結晶構造解析を行い、分子構造を決定した。

【結果と考察】

包摂化合物結晶については、様々な組み合わせの結晶を試したが、今期は構造解析に十分な回折点を得られなかった。新しく有機合成された化合物の結晶では、高角まで回折点を集めることができたため、高い分解能で構造を決定することができた。構造解析の詳細については、有機合成過程と合わせて論文で報告される予定である。

平成 25 年度（後期）

新規なキャリア輸送材料の合成と電子デバイスへの応用

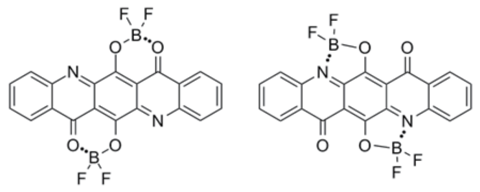
名古屋工業大学・准教授　　小野　克彦

【研究目的】

近年、有機半導体の研究開発が活発に行われている。特に、p 型半導体と比較して材料のバリエーションが少ない n 型半導体において、さまざまな分子が開発されている。我々は、芳香族アレン化合物にホウ素キレートを導入した化合物の合成研究を行ってきた。この結果、分極構造に由来する電子受容性のため、それらが n 型半導体になることを報告した[1,2]。この手法は簡便であることから n 型半導体の開発に有効である。本研究では、さらなる特性向上を目指し、キナクリドンキノンにホウ素キレートを導入した新規物質の合成研究を行った。

【利用手段・方法】

キナクリドンキノンにホウ素キレートを導入する場合、O^O 配位（1）と N^O 配位（2）の二つの分子構造が予想される。しかし、スペクトルでは両者を区別することは困難である。そこで、どちらの構造が生成しているかを調査するために単結晶 X 線構造解析を行った。生成物は溶液中で不安定であり、良好な単結晶がなかなか得られなかった。しかし、戸村正章助教（安全衛生管理室）による支援を受けて構造解析に成功することができた。



1　　2

【結果と考察】

図 1a に示す分子構造から、ホウ素キレートは O^O 配位であった。しかし、当初予想していた構造ではなく、化合物 3 であることが判明した（図 1b）。^{1}H NMR スペクトルで 14 ppm 付近に重水素置換可能なピーク（NH）が観測されており、この結果とも一致する。そのため、キナクリドンキノンへのホウ素キレートでは化合物 1 が生成するものの、高い電子受容性のため直ちに還元されて化合物 3 が得られたと結論した。興味深いことに、化合物 3 を加水分解するとヒドロキノン体が生成するが、これも直ぐに酸化されて最終的にはキナクリドンキノンが再生した。電子の授受を伴うホウ素キレートの脱着反応を解明することができた。

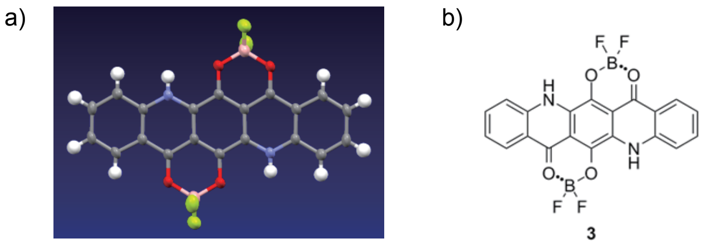


図 1. 化合物 3 の a)分子構造と b)構造式

【参考文献】

[1] K. Ono, H. Yamaguchi, K. Taga, K. Saito, J. Nishida, Y. Yamashita, *Org. Lett.* 2009, *11*, 149–152.

[2] K. Ono, J. Hashizume, H. Yamaguchi, M. Tomura, J. Nishida, Y. Yamashita, *Org. Lett.* 2009, *11*, 4326–4329.

平成 25 年度（後期）

光合成膜蛋白質耐熱化の熱力学的解析

神戸大学大学院 農学研究科・助教　　木村　行宏
茨城大学 理学部・教授　　大友　征宇

【研究目的】

好熱性紅色光合成細菌 *Thermochromatium*（*Tch.*）*tepidum* は紅色細菌の中で唯一の耐熱菌であり、その光捕集 1 反応中心膜蛋白質複合体(LH1-RC)はカルシウム(Ca)との相互作用によって耐熱性を獲得するが、LH1-RC 耐熱化の詳細な分子機構については明らかにされていない。先行研究より、野生型をストロンチウム(Sr)培地で培養すると、安定性が低く、光吸収特性の異なる金属変異体(Sr 置換型 LH1-RC)が生合成されることが報告されている。しかしながら、この Sr を Ca で置換しても野生型と同じ耐熱性や光吸収特性を示さないことから、Sr 置換型の生合成過程において耐熱化に関わる構造的変異が生じている可能性がある。等温滴定カロリメトリー（ITC）では金属イオンの結合に伴うタンパク質構造変化の熱力学的情報が得られるため、野生型と Sr 置換型の比較研究から耐熱性向上因子に関する重要な知見が期待される。

本研究では ITC を用いて Sr 置換型および野生型 LH1-RC と Ca および Sr の相互作用を解析し、LH1-RC の金属結合サイト数、金属結合定数および各種熱力学的パラメータを比較検証することにより、熱力学的視点から LH1-RC 耐熱化の分子機構を明らかにすることを目的とした。

【利用手段・方法】

MicroCal 社製 iTC200 等温滴定熱量分析装置を用いて、野生型あるいは Sr 置換型 LH1-RC と金属カチオン（Ca、Sr）間の相互作用を解析した。Ca 培地で培養した野生型 *Tch.tepidum* および Sr 培地で培養した Sr 置換型 *Tch.tepidum* から高純度の LH1-RC を精製し、EDTA により結合金属を除去した試料をそれぞれ B880 および B870 とした。0.53 mM の B880 あるいは B870 由来αβサブユニットに 25 mM の $SrCl_2$, $CaCl_2$ 水溶液を 120～300 秒間隔で 0.2～0.4μl ずつ滴下し、アポタンパク質と金属カチオンの結合により生じる微小な熱量変化を計測した。得られた結果を解析用ソフト Origin の One site model でフィッティングし、金属/タンパク質結合比、結合定数、エンタルピー変化、エントロピー変化、ギブズの自由エネルギー変化を算出した。

【結果と考察】

B880 および B870 に各金属溶液を滴下することにより、タンパク質と金属イオンの結合に伴う発熱の信号が検出され、これらを One site model で解析した。タンパク質に対する金属イオンのモル数を横軸に、発熱量の積分値を縦軸にプロットした曲線の変曲点から金属イオンとタンパク質の結合比(N)を求めた結果、野生型および Sr 置換型 LH1-RC の構造は Ca 結合サイトを含むサブユニットのおよそ 16 量体であることが判明した。一方、Sr 置換型 LH1-RC に対する Ca の結合反応はエントロピー駆動型、野生型 LH1-RC に対する Ca の結合反応はエンタルピー駆動型であり、相互作用形態が異なっていることが示唆された。また、前者の結合力は後者よりも有意に低かったことから、Sr 置換型 LH1-RC では生合成の過程で Ca 結合サイトに関わる何らかの構造変化が生じていることが示唆され、今後、構造と耐熱性の関連因子を考察する上で有益な知見を得た。

平成 25 年度（後期）

キレート型プロトン性イオン液体中での錯形成と構成成分の拡散

奈良女子大学研究院 自然科学系・教授　　飯田　雅康

【研究目的】

遷移金属イオンとイオン液体との相互作用に関する研究は、将来レドックスフロー電池への応用などにつながる重要な基礎課題である。我々の研究グループは金属イオンを取り込みやすい、独自に開発したキレートアミン型プロトン性イオン液体（以下 PIL）を用いて研究を進めている。このタイプのイオン液体を用いた錯形成の研究は国際的にも未開拓である。本研究は平成 24 年度前期に分子研で行った 15N-NMR による銅イオン(II)の選択的相互作用に関する研究の一環で（一部は下記の参照文献 1）と 2)で発表)、銅イオン添加によるイオン液体の拡散係数への効果を調べるのを目的にする。本学の装置を用いて、同じ PIL 系に対する NMR の緩和時間を測定して銅(II)イオンと PIL との選択的相互作用を調べているが、そのバックグラウンドとして拡散係数への銅(II)塩添加効果の情報が必要となる。粘度測定からも同様な情報が得られようが、貴重なサンプル量が少なくて済むのが本法の長所である。

【利用手段・方法】

核磁気共鳴装置(JNM-ECA600)

二次元 DOSY の手法を一次元に適用し、室温での HHexen(Tf_2N) プロトン性イオン液体 (PIL)の拡散係数とそこへの銅(II)塩添加効果を見た。パルス系列方法としては、オーソドックスな PFG-SE 法とスティミュレーテッドエコーを利用した PFG-BPPLED 法について検討した。

【結果と考察】

正味二日にわたって実験・検討した。まず、標準として「水」の拡散係数を求めた。上記の二種のパルス系列で測定した。オーソドックスな PFG-SE パルス系列で測定した場合は文献値通りの結果が得られたが PFG-BPPLED 系列の場合には十数%もの誤差が出た。(これは後になって装置のグラジエントユニットに不具合があったためと連絡があった) そして、対象にした PIL 系だが、上記の PFG-SE 法で測定した場合、室温ではシグナルが銅(II)イオンの存在でブロードになり過ぎて検出できなかった。一方、PFG-BPPLED 法ではシグナルは現れたものの FG をかけても強度変化が小さすぎて拡散係数は良い精度で求められなかった。

結果的には、残念ながら目的のデータを取ることが出来なかった。本装置で無理なら基本的に常磁性の銅(II)イオンによる緩和への効果が大きすぎて本系に対する NMR による拡散係数の測定は断念せざるを得ないのではないか。よって、多くのサンプル量が必要ではあるが、粘度測定による PIL バルクの動的性質への銅イオンの効果に関する効果を見ることにした。ただし、その後、本学に戻って同系列の NMR 測定を行った際に、7-80℃まで温度を上げればシグナルもかなりシャープになることが分かった。本 PIL は広い温度範囲で安定であることが特徴であるので、今後、高温で測定することも検討したい。

【参考文献】

1) Watanbe, M.; Takemura, S.;　Kawakami, S. ; Syouno, E. ; Kurosu, H.; Harada, M. ; Iida, M. *J. Mol. Liq.*, 2013, *183*, 50-58.

2) 竹村 忍，原田 雅史，飯田 雅康「第 4 回イオン液体討論会 2P32」慶応大学（横浜） 2013 年 11 月

平成 25 年度（後期）

多孔性ポルフィリン亜鉛錯体の結晶構造解析[1]

兵庫県立大学大学院 物質理学研究科・助教　　満身　稔

【研究目的】

近年､金属錯体ユニットを架橋配位子によって繋げた多孔性配位高分子を利用して光電変換素子の光捕集系を開発する研究が注目されている[2]。当研究室では、励起エネルギー移動を起こすことが知られているポルフィリン亜鉛(II)錯体を基本単位に用いた多孔性配位高分子を利用して､高効率での光捕集と超高速励起エネルギー移動を示す光捕集系の構築を目指した研究を行っている。本研究では、亜鉛ポルフィリンユニットを連結する架橋子として 4-ピリジル基をポルフィリン骨格に導入した亜鉛(II)錯体 [Zn(DPyDPh(OMe)$_2$P)]（DPyDPh(OMe)$_2$P ＝ 5,15-bis(3,5-dimethoxyphenyl)-10,20-bis(4-pyridyl)-porphyrinato、図 1)[3]について、異なる溶媒系を用いて結晶化を行い、二種類の新規となる多孔性配位高分子の結晶[Zn(DPyDPh(OMe)$_2$P)]·3DMSO (1)と[Zn(DPyDPh(OMe)$_2$P)]·2*o*-DCB (*o*-DCB = *o*-dichlorobenzene) (2)を得た。これら錯体 1, 2 について、分子科学研究所の施設利用制度を利用して、単結晶 X 線結晶構造解析を行ったので報告する。

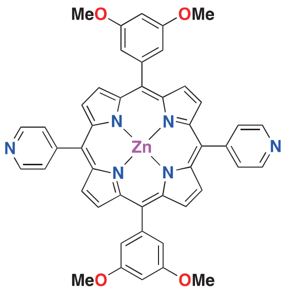


図 1．[Zn(DPyDPh(OMe)$_2$P)]

【利用手段・方法】

極微小結晶用単結晶 X 線回折装置(Rigaku 社製 4176F07 CCD-3)と窒素吹付け型低温装置を利用して、低温での反射強度の測定を行った。

【結果と考察】

錯体 1 の結晶構造を図 2 に示す。X 線結晶構造解析によって、錯体 1, 2 では、平面四配位形の亜鉛ポルフィリンユニットの二つの軸位に、隣接する二つのポルフィリンのピリジル基が配位し、二次元四角格子を形成していることが確認できた。これらの錯体では、シートの積層様式に関して違いがあり、錯体 1 では、二次元シートどうしは隣接する 3,5-ジメトキシフェニル基の間の CH…O 水素結合によって繋がり積層し、積層方向に沿ったチャンネルを持つ多孔性配位高分子であることが分かった。この細孔内には DMSO が含まれている。一方、錯体 2 の二次元シートは、3,5-ジメトキシフェニル基のメチル基と隣接するシートのポルフィリン環のメソ位の炭素原子との間での CH…π相互作用によって繋がり、積層方向に沿ったチャンネルを形成していることが分かった。

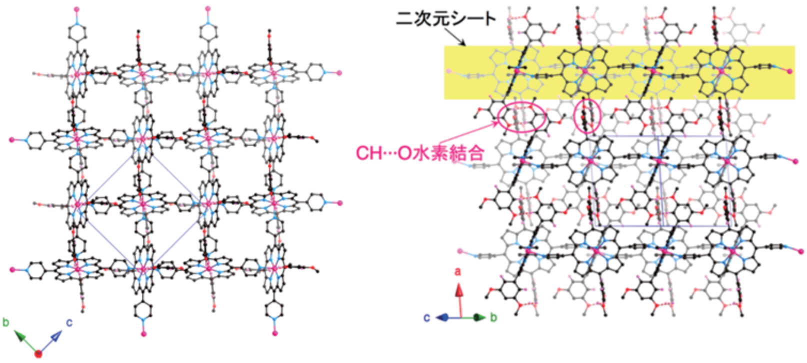


図２．錯体 1 の二次元四角格子構造と積層様式.

【参考文献】

(1) 覚野ら, 多孔性ポルフィリン亜鉛錯体の合成と構造, 錯体化学会第 63 回討論会, 1PA-100 (2013).

(2) Son, H.-J. et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2013, *135*, 862–869.

(3) Kira, A. et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2009, *131*, 3198–3200.

平成 25 年度（後期）

新規な光センサータンパク質の生化学的解析

日本大学 生物資源科学部・助教　　高野　英晃

【研究目的】

高度好熱菌サーマスより見出した LitR は、光感受性物質ビタミン B_{12} をリガンドとして利用する転写調節タンパク質であり、本菌のカロテノイド生産の光誘導に関わる。本研究では LitR タンパク質とアデノシル B_{12}（ビタミン B_{12} の 1 種）の分子間相互作用を明らかにすることを目的とした。

【利用手段・方法】

熱分析装置 MicroCal iTC200 を使用し、セル側には LitR 組み換え蛋白質(野生型)に加えて、アデノシル B12 との相互作用に関わることが予想されているアミノ酸残基に変異を導入した LitR(H177A)と LitR(H132A)の組み換えタンパク質を用いた。一方、シリンジ側には市販のアデノシル B12 を用いた。

【結果と考察】

LitR(野生型)および LitR(H132A)はアデノシル B12 と相互作用することが確認され、両者の解離定数は同程度であった。このことから、LitR の H132 はアデノシル B12 との相互作用に関与しないことが確認された。一方、LitR(H177A)はアデノシル B12 と相互作用しなかったことから、H177A はアデノシル B12 と相互作用に必須なアミノ酸残基であることが明らかになった。

本機器の利用ははじめてでしたが、技術員の方が親切かつ丁寧に教えてくださり、基本的な機器の使用方法を習得することができました。

平成 25 年度（後期）

BEDT-TTF 銀錯体の極低温構造解析

名城大学 農学部・契約研究員　　平松　孝章

【研究目的】

(BEDT-TTF)$Ag_4(CN)_5$ 錯体は、銀ポリアニオン$[Ag_4(CN)_5]^-$の空孔内に BEDT-TTF 分子が嵌りこんだ結晶構造をもつ。BEDT-TTF 分子と最近接の 4 つの BEDT-TTF 分子との間の分子間相互作用が等価であることから、この錯体は特に有機分子では他に例のないダイヤモンド型の磁気相互作用を持つと考えられる。この錯体は 1980 年代後半に、Geiser らによってバンド計算、ESR 測定の結果から 3 次元的金属と結論されている。しかし、我々が最近行った電導度測定では室温から半導体的挙動を示し、磁性の測定(NMR, SQUID)から 100 K 近傍で弱強磁性転移を起こしていることが明らかになった。

本研究では、極低温までの X 線回折測定により、この錯体の構造相転移の有無ならびに弱強磁性相における結晶構造について検討することを目的とした。

【利用手段・方法】

単結晶 X 線回折装置(微小結晶用) Rigaku MERCURY CCD-3 とヘリウムを冷媒とした吹付冷却装置を利用した。

【結果と考察】

温度による結晶構造と格子定数の変化を確認するため、冷却速度 2 K / min で、300 K, 275 K, 250 K, 225 K, 200 K, 180 K と温度を下げながら測定を行ったところ、200 K 以下では逆格子空間で回折点が広がっているため格子の決定が困難になり、180 K では格子を決定することが出来なかった。

次に、冷却速度 10 K / min で 300 K から 80 K に冷却した測定では格子が決定できたため、構造解析を行った。300 K と同様の *Fddd* の空間群を仮定すると $R_1 = 6.0$ %で構造が決定できた。但し、消滅則の破れがあり、より低い対称性になっている可能性も示唆されている。さらに 12 K まで冷却したところ、これまでの反射点の間にも反射が観測された（図 1)。

以上の結果から、弱強磁性転移が起こる温度よりも高い 200 K 付近から構造相転移が起きはじめている可能性があり、その際の *Fddd* からの対称性の低下に伴い、転移双晶を生じていると考えられる。また、12 K ではさらにそれとは異なる変調構造となっていることが示唆された。

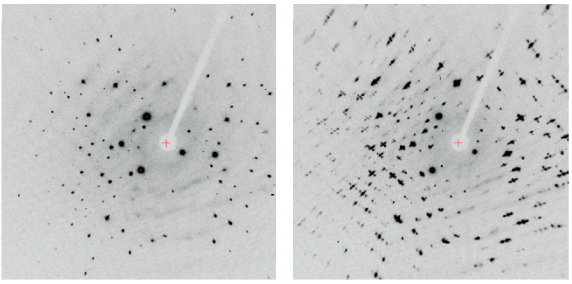


図 1. 振動写真 (振動角 5°)、左 300 K, 右 12 K。

今回の施設利用により(BEDT-TTF)$Ag_4(CN)_5$の結晶構造の温度変化についての概観が得られた。今後は、さらにその詳細の検討を行うため、同装置の利用を計画している。その際、測定用 PC は動作が遅いため、新しく導入された解析用 PC での測定データの処理を考えている。しかし、現状では Crystal Clear が正常に動作しないため、その対応を希望する。

【関連学会発表】

日本化学会第 94 春季年会, 名古屋, 2014 年 3 月, 1D3-34A

平成 25 年度（後期）

183W 核磁気共鳴法によるタングステン錯体の構造研究

岡山大学大学院 自然科学研究科・講師　　押木　俊之

【研究目的】

新たな高活性タングステン錯体触媒(メタセシス用)の開発につなげるため、溶液中に混在するタングステン錯体を直接観測する 183W NMR を用いて、触媒活性を発現するタングステン錯体の挙動を直接観測する。

私が最近みつけた新しい触媒系は、複数のタングステン種が混じっていることが、1Hおよび13CNMRからわかっている。しかし、特有のある配位子構造が、詳細な分子構造解析の障害となっており、何種類のタングステン種が触媒系で発生しているのかがわからない。

そこで、タングステン核(183W)を直接、NMR で観測し、タングステン種の価数や配位数を明らかにし、触媒活性との相関を調べる独自のアプローチにより、高活性を発現するタングステン種の特徴を明らかにすることを狙う。得た 183W NMR データと他の分光学的データを組み合わせることにより、高活性タングステン錯体触媒の構造を解明する。

【利用手段・方法】

これまでにタングステン錯体触媒に関して、183W NMR を活用する報告例はほとんどなく、データの蓄積もされていない。183W 核は、低周波核種であり低感度である。[1]そのため、実際の測定には低周波対応の 10mm 溶液プローブが必要となる。このプローブを備えた機器センターの NMR(LA-500)を活用し、標準サンプルを含めた既知のタングステン錯体の測定をまず計画した。

サンプルは、岡山大学で不活性雰囲気下において合成、サンプル調製し、テフロンコックのついた密閉サンプルチューブごと機器センターに持ち込んだ。

【結果と考察】

(1) 2014 年 2 月 12-14 日の測定

タングステン酸ナトリウム 2.0g を 2.3mL の水に室温で溶かし(ほぼ飽和溶液)、ロック用に重トルエンを封入したキャピラリーを入れて測定した。遅延時間は 10 秒に設定した。なお、今後の測定でプロトンを含まない WCl6 の検出の必要性があったので、ノンデカップルで測定した。約 10 分ほどの積算で、タングステン酸ナトリウムのシグナルは明瞭に確認できた。

次に、W(CO)6 (THF 溶液)、 WCl6 (トルエン溶液)、 タングステン(IV)イミド錯体(トルエン溶液)の測定をさまざまな条件で行ったが、まったくシグナルが観測されなかった。

(2) 2014 年 3 月 17-19 日の測定

文献再調査により、W(CO)6 では緩和時間が 80 秒に達することがわかった。[2, 3] シグナルが観測されない原因が、緩和時間によるものと推定した(遅延時間を10秒しかとっていない)。JEOL RESONANCE 社などに相談したところ、緩和試薬が有効かも知れないとの助言を得た。そこで緩和試薬(Cr(acac)3)をサンプルに加えて、前回シグナルが観測できなかった WCl6、 タングステン(IV)イミド錯体を測定

した。Cr(acac)3 の量は、サンプルチューブあたり、約 14mg (約 20 mM)とした。

残念ながら、今回もシグナルは観測できなかった。測定の直前に、多核測定の経験が豊富な研究者にも相談したところ、錯体の場合はシグナルを観測すること自体が難しく、文献に書いてあるような位置(価数から予測される化学シフト)からはずれた場所に出る場合もあるため、非常に広い観測幅になる 183W での錯体シグナルの観測はかなり腰を据えてやる必要があることがわかった。すなわち、測定パラメータがほんとうに妥当だったのか、非常に疑問がある。

もう一点は、タングステン錯体の溶解性の問題である。第 1 回目の測定後に、W(CO)6 の溶解度を調べたところ、2.3mL の THF に溶解する W(CO)6 はわずか 50mg 前後であることがわかった。W(CO)6 の化学シフトは報告されてはいるが、[4] ここまで溶解度が低いと膨大な積算時間を費やすだけで触媒研究としての 183W NMR がほんとうに有効なのかすら疑問が出てくる。WCl6 の場合も、溶液には濃い青色がつくものの(トルエン)、ほんとうの溶解性がどのくらいなのか、定量的なデータを所得する必要を感じる。そもそも、今回利用申請したきっかけは、私が最近みつけた新しい触媒系が有機溶媒によく溶けるので、だからこそ高濃度サンプルが確保できると思ったわけである。しかし、実際の定量的な溶解度データはもっていなかったため、単に濃度が低いからシグナルがみえなかった(積算不足)だけなのかがはっきりしない。

以上まとめると、今年度の測定では、標準サンプルであるタングステン酸ナトリウムのシグナルを観測したのみに終わり、緩和時間を考慮した緩和試薬の適用はうまくいかなかった。当初予定では、私自身が合成した新触媒の測定をする予定だったが、そこには至らなかった。

これを踏まえて、以下の 2 つの対策を進めて、26 年度以降も 183W NMR に取り組んで行くつもりである。

(1) JEOL RESONANCE 社と測定条件について抜本的に再検討する。ノンデカップルに固執することが妥当なのかを含む。

(2) さまざまなタングステン錯体の溶解度データを実験室で確実に得る。

【参考文献】

1) 北川進ら, 多核種の溶液および固体 NMR, 三共出版, 2008 年, p 148–150.

2) Mann, B. E. *Annual Reports on NMR Spectroscopy* 1991, *23*, 141.

3) Macchioni, A.; Pregosin, P. S.; Rüegger, H.; van Koten, G.; van der Schaaf, P. A.; Abbenhuis, R. A. T. M. *Mag. Res. Chem.* 1994, *32*, 235.

4) Benn, R.; Brevard, C.; Rufinska, A.; Schroth, G. *Organometallics* 1987, *6*, 938.

平成24年度研究報告一覧

1．学術論文　（49報）

M. WATANABE, S. TAKEMURA, S. KAWAKAMI, E. SYOUNO, H. KUROSU, M. HARADA, M. IIDA, "Sites of protonation and copper(II)-complexation in protic ionic liquids comprised of N-hexylethylenediaminium cation," *Journal of Molecular Liquids*. **183**, 50-58 (2013).

Y. YOSHIDA, Y MAWATARI, A. MOTOSHIGE, R. MOTOSHIGE, T. HIRAOKI, M. WAGNER, K. MüLLEN, and M. TABATA, "Accordion-like Oscillation of Contracted and Stretched Helices of Polyacetylenes Synchronized with the Restricted Rotation of Side Chains," *J.Am.Chem.Soc.***135**, 4110-4116 (2013).

T. NAKAMURA, K. SASAMORI, T. KODAMA, K. KIKUCHI, W. FUJITA, "Preparation, Crystal Structure, and Magnetic Properties of New Dithiolene Ligand, 1,3,2-Dithiazole-4-thione-thiolate, and its Metal Complex," *Chem. Asian J.* **8**, 348(2013).

W. FUJITA, K. KIKUCHI, W. MORI, "Crystal Growth, Structure and Magnetic Properties of a Two-dimensional Triangular Lattice Magnet $Cu_2(OH)_3HCO_2$", *Chem. Asian J.* **12**, 2830 (2012).

M. WATANABE, S. TAKEMURA, S. KAWAKAMI, E. SYOUNO, H. KUROSU, M. HARADA, M.IIDA, "Sites of protonation and copper(II)-complexaIion in protic liquids comprised of N-hexylethylenediaminium cation", *J :Mol. Liq*. **183**, 50-58(2013).

H. TSUJI, M. YASUDA, T. SHIROHATA, H. FUJIWARA, T. SUGIMOTO, Y. MISAKI, "Structures and electrical properties of a new molecular conductor $(BSM\text{-}TTP)_4(PF6)_3\,(C_6H_5Cl)_2$", *Physica Status Solidi C*. **9**(5), 1149-1151(2013).

T. SHIRAHATA, T. ITO, S. TOKI and Y. MISAKI, "Synthesis of a new donor, MOET-TTP and crystal structures, electrical and magnetic properties of $(MOET\text{-}TTP)_2MCl_4$ (M = Fe and Ga)", *Phy. Status Solidi B*. **249**(5), 929-932(2013).

K. ISHIDZU, M. ASHIZAWA, M. WATANABE, T. SHIRAHATA and Y. MISAKI, "Synthesis, structures and properties of molecular conductors based on bis-fused donors composed of (thio) pyran-4-ylidene-1,3-dithiole and tetraselenafulvalene", *Crystals*. **2**, 1092-1107(2012).

T. WATANUKI, S. KASHIMOTO, D. KAWANA, J. YAMAZAKI, A. MACHIDA, Y. TANAKA and T. J. SATO, "lntennediate-valence icosahedral Au-AI-Yb quasicrystal," *Phys. Rev.B.* **86**, 094201(2012).

M. SAKAGUCHI, T. OHURA, T. IWATA and Y. E-ROGER, "Nano cellulose particles covered with block copolymer of cellulose and methyl methacrylate produced by solid mechano chemical polymerization", *Polymer Degradation and Stability*. **97**, 257-263, 2012.

C. KITAMURA, Y. TANIGAWA, T. KOBAYASHI, H. NAITO, H. KURATA, T. Kawase, "17,17-Dialkyltetrabenzo[a,c,g,i]fluorenes with extremely high solid-state fluorescent quantum yields: Relationship between crystal structure and fluorescent properties", *Tetrahedron*. **68**, 1688-1694(2012).

C. KITAMURA, "Tuning the Solid-Steate Optical Properties of Tetracene Derivative by Modification of the Alkyl Side-Chains: Fluorescence Quantum Yield in Acenes Larger than Anthracene", *The Chemial Record.***12**, 506-514(2012).

M. SAKAGUCHI, M. MAKINO, T. OHURA, T. IWATA, "Mechanoanions produced by mechanical fracture of bacterial cellulose: Ionic nature of glycosilic linkage and electrostatic charging", *J. Phys. Chem. A*. **116**, 9872- 9877 (2012) .

Y. OKAMOTO and T. AKITSU, "Viscosity Dependence of Solid-State CD Peaks of Chiral Schiff Base Ni(II) and Cu(II) Complexes in PMMA SoftMater Matrices," *J. Chem. Chem. Eng.* **7** , 487-494 (2013).

M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Bis(tetra-*n*-butylammonium) Bis(5,6-dicyanopyrazine-2,3- dithiolato-$\kappa^2 S,S'$)palladium(II), "*Acta Crystallogr. Sect. E: Struct. Rep. Online.* **68**, m57-m57 (2012).

Z. CONG, T. KURAHASHI, and H. FUJII, "Formation of Iron(III) *Meso*-Chloro -Isoporphyrin as a Reactive Chlorinating Agent from Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radical", *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 4469-4472 (2012).

C. WANG, T. KURAHASHI, and H. FUJII, "Structure and Reactivity of Iodosylarene Adduct of Manganese(IV) Salen Complex", *Angew. Chemie. Int. Ed.* **51**, 7809-7811 (2012).

A. TAKAHASHI, D. YAMAKI, K. IKEMURA, T. KURAHASHI, T. OGURA, M. HADA, and H. FUJII, "The Effect of the Axial Ligand on the Reactivity of the Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radical Complex: Higher Stabilization of the Product State Relative to the Reactant State", *Inorg. Chem.* **51**, 7296-7305 (2012).

T. KURAHASHI and H. FUJII, "Comparative Spectroscopic Studies of Iron(III) and Manganese(III) Salen Complexes Having a Weakly-Coordinating Triflate Axial Ligand", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **85**, 940-947 (2012). (BCSJ Award Article)

Z. CONG, S. YANAGISAWA, T. KURAHASHI, T. OGURA, S. NAKASHIMA, and H. FUJII, "Synthesis, Characterization, and Reactivity of Hypochlorito-Iron(III) Porphyrin Complexes", *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 20617-20620 (2012).

K. YAZAWA, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, T. OHATA, A. AOKI, K. NISHIMURA, H. KAJI, and T. ASAKURA, "Determination of accurate 1H positions of alanine tripeptide with anti-parallel and parallel β-sheet structures by high resolution 1H solid state NMR and GIPAW chemical shift calculation", *Chem.Comm.***48**, 11199-11201 (2012).

T. YOKOYAMA and K. EGUCHI, "Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/Anti-Invar Effects in Mn Alloys", *Phys. Rev. Lett.***110**, 075901 (2013).

T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, T. METHFESSEL, S. DIEHL and H. -J. ELMERS, "Giant Magnetic Anisotropy Energy and Coercivity in Fe island and atomic wire on W(110)", *Phys. Rev. B* **86**, 144418 (2012).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Growth process and magnetic properties of iron nanoparticles deposited on Si3N4/Si(111)-(8×8)", *Phys. Rev. B* **85**, 174415 (2012).

Y. FURUTANI, K. FUJIWARA, T. KIMURA; T. KIKUKAWA, M. DEMURA and H. KANDORI, "Dynamics of Dangling Bonds of Water Molecules in pharaonis Halorhodopsin during Chloride Ion Transportation," *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 2964-2969 (2012).

Y. KOWAKA, T. YAMANAKA and M. BABA, "Electronic, vibrational, and rotational structures in the S0 (1A1) and S1 (1A1) states of phenanthrene," *J. Chem. Phys.* **136**, 154301 -154310(2012).

Y. KOWAKA, N. NAKAYAMA, T. ISHIMOTO, U. NAGSHIMA, T. YAMANAKA, N. OZAWA and M. BABA, "Internal conversion in the $S_1{}^1B_{3u}$ state of pyrene," *Chemical Physics*. **400**, 178-184 (2012).

Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN, A. M. ZHELTIKOV, T. FUJI, "Phase-stable sub-cycle mid-infrared conical emission from filamentation in gases," *Opt. Express.* **20**, 24741-24747 (2012).

T. FUJI and Y. NOMURA, "Generation of phase-stable sub-cycle mid-infrared pulses from filamentation in nitrogen," *Appl. Sci.* **3**, 122-138 (2013).

S. HIGASHIBAYASHI, R. TSURUOKA, Y. SOUJANYA, U. PURUSHOTHAM, G. N. SASTRY, S. SEKI, T. ISHIKAWA, S. TOYOTA and H. SAKURAI, "Trimethylsumanene: Enantioselective Synthesis, Substituent Effect on Bowl Structure, Inversion Energy, and Electron Conductivity," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **85**, 450-467 (2012).

J.-J. CHEN, S. ONOGI, Y.-C. HSIEH, C.-C. HSIAO, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and Y.-T. WU, "Palladium-catalyzed Arylation of Methylene-Bridged Polyarenes: Synthesis and Structures of 9-Arylfluorene Derivatives," *Adv. Synth. Catal.* **354**, 1551-1558 (2012).

R. N. DHITAL and H. SAKURAI, "Anomalous Efficacy of Bimetallic Au/Pd Nanoclusters in C-Cl Bond Activation and Formal Metathesis-type C-B Bond Activation at Room Temperature," *Chem. Lett.* **41**, 630-632 (2012).

Q.-T. TAN, S. HIGASHIBAYASHI, S. KARANJIT and H. SAKURAI, "Enantioselective synthesis of a chiral nitrogen-doped buckybowl", *Nat. Commun.* **3**, 891 (2012).

S. ONOGI, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Microwave-assisted Synthesis of Methyl (1*S*,2*R*,4*S*, 5*R*)-7-Aza-5-hydroxybicyclo[2.2.1]heptan-2-carboxylate through Unexpected Stereoselective Substitution Reaction", *Tetrahedron Lett.* **53**, 3710-3712 (2012).

Y. MORITA, S. NAKAO, S. HAESUWANNAKIJ, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Emission Amplification by Sumanene Nanocrystals in an *Onigiri*-Type Organic-Organic Assembly", *Chem. Commu.* **48**, 9050-9052 (2012).

O. SOPHIPHUN, J. WITTAYAKUN, R. N. DHITAL, S. HAESUWANNAKIJ, A. MURUGADOSS and H. SAKURAI, "Gold/Palladium Bimetallic Alloy Nanoclusters Stabilized by Chitosan as Highly Efficient and Selective Catalyst for Homocoupling of Arylboronic Acid", *Aust. J. Chem*. **65**, 1238-1243 (2012).

P. KAEWMATI, E. SOMSOOK, R. N. DHITAL and H. SAKURAI, "Aerobic Oxygenation of Phenylboronic Acid Promoted by Thiol under Gold-free Conditions: A Warning against Gold Nanoparticle Catalysis", *Tetrahedron Lett.* **53**, 6104-6106 (2012).

H. KITAHARA and H. SAKURAI, "Addition versus Oxygenative Cleavage: Two Contradictory Reactivities in the Reaction of *N*-Benzyl 4-Pentenylamine Catalyzed by Colloidal Nanogold under Aerobic Conditions", *Chem. Lett.* **41**, 1328-1330 (2012).

B. M. SCHMIDT, S. SEKI, B. TOPOLINSKI, K. OHKUBO, S. FUKUZUMI, H. SAKURAI and D. LENTZ, "Electonic Properties of Trifluoromethylated Corannulenes", *Angew. Chem. Int. Ed.* **51**, 11385-11388 (2012).

R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK, K. BOBUATONG, M. EHARA and H. SAKURAI, "Low-temperature Carbon–Chlorine Bond Activation by Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters: An Application to Ullmann Coupling", *J. Am. Chem. Soc*. **134**, 20250-20253 (2012).

A. MURUGADOSS, K. OKUMURA and H. SAKURAI, "Bimetallic AuPd Nanocluster Catalysts with Controlled Atomic Gold Distribution for Oxidative Dehydrogenation of Tetralin", *J. Phys. Chem. C.* **116**, 26776-26783 (2012).

Y. ZHANG, S. YAMAMOTO, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Application of paramagnetic NMR-validated molecular dynamics simulation to the analysis of a conformational ensemble of a branched oligosaccharide," *Molecules.* **17**, 6658–6671 (2012).

Y. UEKUSA, S. MIMURA, H. SASAKAWA, E. KURIMOTO, E. SAKATA, S. OLIVIER, H. YAGI, F. TOKUNAGA, K. IWAI and K. KATO, "Backbone and side chain ^{1}H, ^{13}C, and ^{15}N assignments of the ubiquitin-like domain of human HOIL-1L, an essential component of linear ubiquitin chain assembly complex," *Biomol. NMR Assign.* **6**, 177-180 (2012).

M. YAGI-UTSUMI, S. YOSHIKAWA, Y. YAMAGUCHI, Y. NISHI, E. KURIMOTO, Y. ISHIDA, T. HOMMA, J. HOSEKI, Y. NISHIKAWA, T. KOIDE, K. NAGATA and K. KATO, "NMR and mutational identification of the collagen-binding site of the chaperone Hsp47," *PLoS ONE* **7**, e45930 (2012).

T. YAMAGUCHI, T. UNO, Y. UEKUSA, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "Ganglioside-embedding small bicelles for probing membrane-landing processes of intrinsically disordered proteins,"*Chem. Commun.* **49**,1235- 1237 (2013).

Y. KAMIYA, K. YANAGI, T. KITAJIMA, T. YAMAGUCHI, Y. CHIBA and K. KATO, "Application of metabolic ^{13}C labeling in conjunction with high-field nuclear magnetic resonance spectroscopy for comparative conformational analysis of high mannose-type oligosaccharides," *Biomolecules.* **3**, 108-123 (2013).

M. YAGI-UTSUMI, Y. YAMAGUCHI, P. BOONSRI, T. IGUCHI, K. OKEMOTO, S. NATORI and K. KATO, "Stable isotope-assisted NMR characterization of interaction between lipid A and sarcotoxin IA, a cecropin-type antibacterial peptide," *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **431**, 136-140 (2013).

K. SHIBATOMI, Y. SOGA, A. NARAYAMA, I. FUJISAWA and S. IWASA, "Highly Enantioselective Chlorination of β-Keto Esters and Subsequent SN2 Displacement of Tertiary Chlorides: A Flexible Method for the Construction of Quaternary Stereogenic Centers," *J. Am. Chem. Soc.* **134** (2012), 9836-9839.

K. SHIBATOMI, Y. SOGA, A. NARAYAMA, I. FUJISAWA and S. IWASA, "Highly Enantioselective Chlorination of β-Keto Esters and Subsequent S_N2 Displacement of Tertiary Chlorides: A Flexible Method for the Construction of Quaternary Stereogenic Centers," *J. Am. Chem. Soc.* **134**, 9836-9839(2012).

２．学会発表　（125件）

S. OOHASHI, H. TAKAHASHI, M. TOMURA, K. ONO, Y. YAMAMOTO, A. YOSHINO and K. TAGA, "Crystal Structure and Physical Properties of Bisquaternary Ammonium Salicylate Surfactant (14-4-14)-2Sal, "International Association of Colloid and Interface Scientists, Conference (IACIS 2012)," Sendai (Japan), May 2012.

今枝優太, 平野慎二, 戸村正章, 西田純一, 山下敬郎, 小野克彦,「N-Boc ピロール誘導体を用いた熱変換型有機半導体の研究開発」, 第 43 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 愛知, 2012 年 11 月.

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Nanoscale Circular Dichroism of 2D Chiral Nanostructures," JSAP-OSA Joint Symposia (73rd JSAP Autumn Meeting, 2012), Matsuyama (Japan), September 2012.

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Direct Imaging of Nanoscale Circular Dichroism," The international conference on Near-filed optics, Nanophotonics and related techniques (NFO12), San Sebastian (Spain), September 2012.

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Near-field Circular Dichroism Imaging for Nanostructures," Yamada Conference LXVI, Tokyo (Japan), May 2012.

成島哲也, 岡本裕巳,「キラルなナノ構造体の局所光学活性 —近接場ナノイメージング—」, 日本分光学会北海道支部シンポジウム, 北海道, 2013 年 3 月.(招待講演)

成島哲也, 岡本裕巳,「近接場光学顕微鏡によるナノスケール円偏光二色性イメージング」, 日本分光学会中部支部講演会, 愛知, 2013 年 3 月.(招待講演)

成島哲也，岡本裕巳,「２次元金属ナノ構造体のキラリティの局所観察」，日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2012，東京, 2012 年 10 月.

成島哲也，岡本裕巳,「ナノスケール円偏光二色性の直接イメージング」，日本光学会・ナノオプティクス研究グループ研究討論会 第 20 回記念シンポジウム，東京, 2012 年 5 月.

藤井 浩,「ヘム軸配位子による高原子価鉄オキソヘム錯体の反応性を制御する分子機構」，第 39 回生体分子科学討論会，宮城, 2012 年 6 月.

H. FUJII, "^{13}C and ^{15}N NMR Spectroscopy of Heme-bound Cyanide (^{13}C^{15}N) in Ferric Heme Peroxidases", 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines, Jeju (Korea), July 2012.

藤井 浩,「生体内における常磁性金属イオンと有機ラジカルとの磁気的相互作用について」，分子研研究会「レーザー分光および磁気測定による分子構造探求の新展開」,愛知, 2012 年 7 月.

高橋昭博，倉橋拓也，藤井 浩,「鉄４価ポルフィリン π-カチオンラジカル錯体の軸配位子が反応性を制御する機構」，第 62 回錯体化学討論会，富山, 2012 年 9 月.

倉橋拓也，藤井 浩，「コバルト 2 価錯体の空気酸化により生成するコバルトサレン触媒の特異な配位子ラジカル特性」，第 62 回錯体化学討論会，富山, 2012 年 9 月.

Zhiqi Cong，倉橋拓也，藤井 浩,「メソクロロ鉄 3 価イソポルフィリン錯体の合成及び塩素化反応」，第 62 回錯体化学討論会，富山, 2012 年 9 月.

C. WANG, T. KURAHASHI, H. FUJII, "Structure-Enantioselectivity Relationship of Iodosylarene Adducts of a Chiral Manganese(IV) Salen Complex", 第 62 回錯体化学討論会,富山, 2012 年 9 月.

H. FUJII, "Reactions of Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radicals with Chloride Ion", 40th International Conference on Coordination Chemistry, Valencia (Spain), September2012.

Zhiqi Cong，倉橋拓也，藤井 浩,「鉄 3 価ポルフィリン－次亜塩素酸付加錯体の合成と同定及び酸化反応の研究」，第 45 回酸化反応討論会，愛知 , 2012 年 11 月.

藤井 浩,「金属酵素の活性部位の電子構造と酵素反応」，分子研研究会「生物物質科学の展望」，愛知, 2013 年 1 月.

藤井 浩,「軸配位子による高原子価鉄オキソヘム錯体の反応性の制御機構」,分子研研究会「生体配位化学の最前線と展望」，愛知 , 2013 年 2 月.

M. TANIO, and K. NISHIMURA, "NMR and Native-PAGE analyses of the phospholipase C-δ1 pleckstrin homology domain", 第 51 回 NMR 討論会，愛知, 2012 年 11 月.

矢澤宏次，鈴木不律，西山裕介，西村勝之，梶弘典，朝倉哲郎，「生体分子の ^{1}H 精密位置決定～超高速 MAS^{1}H 固体 NMR による ^{1}H DQMAS 測定と GIPAW 化学シフト計算～」，第 51 回 NMR 討論会，愛知, 2012 年 11 月.

N. TOKUDA, M. TANIO, K. NISHIMURA, T. KOHNO, D. YOKOGAWA, T. IKEGAMI, S. TUZI, "脂質二重膜上における Def6 PH ドメインの高次構造の解析 Conformational properties of the Def6 PH domain located at the lipid bilayer surface", 第 50 回日本生物物理学会年会，名古屋, 2012 年 9 月.

奥下慶子，矢澤宏次，青木昭宏，西村勝之，朝倉哲郎，「新規固体 NMR 法による絹構造の解明」，平成 24 年度繊維学会秋季研究発表会，福井, 2012 年 9 月.

矢澤宏次, 杉本真理, 西山裕介, 西村勝之, 鈴木不律, 梶弘典, 朝倉哲郎,「[1]H 固体 NMR の新時代 ～[1]H の位置からみるペプチドおよびタンパク質の分子間構造解析～」, 第61回高分子討論会, 愛知, 2012年9月.

大畑卓也, 矢澤宏次, 青木昭宏, 西山裕介, 西村勝之, 朝倉哲郎,「高分解能 [1]H 固体 NMR を用いた家蚕絹結晶部モデルペプチドの分子間構造解析」, 第 61 回高分子討論会, 愛知, 2012 年 9 月.

M. TANIO, K. NISHIMURA, "The short α2-helix of the phospholipase C-δ1 pleckstrin homology domain contributes to stable IP3 binding", 第 50 回日本生物物理学会年会, 愛知, 2012 年 9 月.

N. TOKUDA, M. TANIO, K. NISHIMURA, T. KOHNO D. YOKOGAWA, T. IKEGAMI, S. TUZI, 「脂質二重膜上における Def6 PH ドメインの高次構造の解析」, 第50回日本生物物理学会年会, 愛知, 2012年9月.

K. YAZAWA, Y. NICHIYAMA, K. NISHIMURA, F. SUZUKI, H. KAJI and T. ASAKURA, "Probing intermolecular structures of beta-sheet of alanine oligomers by high resolution [1]H solid state NMR with ultra high field and ultra fast MAS", XXVth International Conference on Magnetic Resonance, Lyon (France), August 2012.

M. TANIO, and K. NISHIMURA, 「The short α2-helix of the phospholipase C-δ1 pleckstrin homology domain stabilizes the protein-IP3 interaction」, 第 12 回日本蛋白質科学会年会, 愛知, 2012 年 6 月.

K. YAZAWA, K. MIYAZAWA, T. OHATA, A. AOKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA, and T. ASAKURA, 「Analysis of intermolecular structures of alanine oligopeptides by ultra high field 1H solid state NMR」, 第 61 回高分子学会年次大会, 横浜 2012 年 5 月.

矢澤宏次, 西山裕介, 樋岡克哉, 西村勝之, 大畑卓也, 朝倉哲郎,「超高磁場＋超高速回転 MAS による高分解能 [1]H 固体 NMR－DQ/MAS を用いたアラニンオリゴペプチドの分子間構造解析」, 第 51 回固体 NMR・材料フォーラム, 東京, 2012 年 5 月.

横山利彦,「紫外磁気円二色性光電子顕微鏡」日本光学会(応用物理学会)第 39 回冬期講習会「光と磁気－基礎から応用まで－」(招待講演), 東京, 2013 年 1 月.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦, 「軟 X 線吸収分光法を用いた Si(111)基板上バナジルフタロシアニンの分子配向と磁気特性に関する研究」, 第 26 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 愛知県, 2013 年 1 月.

中川剛志, 横山利彦,「Fe/W(110)における XMCD による巨大保持力観測と Ni/Cu(001)の水素吸着過程における UV MCD PEEM による磁区変化観測」(招待講演) 日本表面科学会放射光表面科学部会顕微ナノ材料科学合同シンポジウム, 神奈川, 2012 年 11 月.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦, 「Si(111)基板上バナジルフタロシアニン薄膜の XAS/XMCD 測定」, 第 8 回放射光表面科学研究部会・顕微ナノ材料研究部会合同シンポジウム, 神奈川, 2012 年 11 月.

T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, T. METHFESSEL, S. PERTERT and H. –J. ELMERS, "Giant Magnetic Anisotropy Energy and Coercivity in Fe island and atomic wire on W(110)," 21th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Shanghai, (China), September 2012.

Y. TAKAGI, K. EGUCHI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Magnetic Property of Iron Phthalocyanine Films on Metal Surfaces studied by XMCD," The 21th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS21), Shanghai(China) , September 2012.

高木康多, 江口敬太郎, 中川剛志, 横山利彦,「金属表面上の鉄フタロシアニン薄膜の XMCD 測定」, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜, 2012 年 9 月.

高木康多, 江口敬太郎, 中川剛志, 横山利彦,「金属表面上の鉄フタロシアニン薄膜のXMCD測定」, 第15回XAFS討論会, 鳥取, 2012年9月.

中川剛志, 高木康多, 横山利彦, T. METHFESSEL, S. PERKERT, H. -J. ELMERS, 「巨大保磁力を有するFe/W(110)のX線磁気円二色性による研究」, 第15回XAFS討論会, 鳥取, 2012年9月.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦, 「X線吸収分光法によるSi(111)上におけるバナジルフタロシアニンの分子配向と磁気特性」, 第15回XAFS討論会, 鳥取, 2012年9月.

Y. TAKAGI, K. EGUCHI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Magnetic Property of Iron Phthalocyanine Films on Metal Surfaces studied by XMCD," 15th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure (XAFS-XV), Pullman Beijing West Wanda , Beijing(China), July 2012.

T. NAKAGAWA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, T. METHFESSEL, S. PERTERT and H. -J. ELMERS, "Giant Magnetic Anisotropy Energy and Coercivity in Fe island and atomic wire on W(110) ," International Conference on Magnetism, Busan (Korea), July 2012.

T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Energy Filtered Magnetic Circular Dichroism PEEM for Magnetic Domain Observation," 8th International Workshop on LEEM/PEEM, Regal Kowloon Hotel, Hong Kong (China), November 2012.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦, 「Si(111)基板上におけるバナジルフタロシアニンの分子配向と磁気特性」, ナノ学会第10回大会, 大阪, 2012年6月.

T. KIMURA, H. KANDORI, Y. FURUTANI, "Time-resolved infrared study on the light-driven chloride ion pump protein," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji Temple, Nara (Japan), January 2012.

T. KIMURA, S. DOUKI, R. ISHITANI, O. NUREKI, Y. FURUTANI, cIon-selective mechanism of Mg2+ transporter MgtE studied by ATR-FTIR spectroscopy," 4th Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences, Nara (Japan), January 2012.

Y. FURUTANI, "Ion-Protein Interactions Studied by ATR-FTIR Spectroscopy," The 16th East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Hsinchu (Taiwan), April 2012.

Y. FURUTANI, "Ion-protein Interactions Studied by ATR-FTIR Spectroscopy", 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC) 2012, Kuala Lumpur (Malaysia), October 2012.

岡本泰典, 澤井仁美, 小倉麻梨子, 内田毅, 石森浩一郎, 林　高史, 青野重利, 「*Listeria monocytogenes* のヘム取込み系におけるヘム結合タンパク質HupDの性質」, 日本化学会第93春季年会, 滋賀, 2013年3月.

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, N. TSURUMACHI, "Frequency-resolved optical gating with electro-optic sampling", Ultrafast Phenomena 2012, TUE.2B.5, July 2012.

Y. NOMURA, T. FUJI, H. SHIRAI, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN, A. M. ZHELTIKOV, "Generation of phase-stable half-cycle mid-infrared pulses through filamentation in gases", Ultrafast Phenomena 2012, Lausanne(Switzerland), July 2012.

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN, A. M. ZHELTIKOV, "Generation of half-cycle mid-infrared pulses through filamentation in gases", LPHYS2012, Calgary(Canada), July 2012.[Invited]

T. FUJI, Y. NOMURA, H. SHIRAI, K. ISHII, N. TSURUMACHI, A. A. VORONIN, A. M. ZHELTIKOV, "Phase-stable half-cycle mid-infrared pulses generated through filamentation in gases", COFIL2012, Arizona (USA), October 2012. [Invited]

藤貴夫,「超短光パルスの振動電場を測定する新しい方法」, 分子研研究会　「新しい光の創成と物質科学 — 精密計測と操作への展開」分子研研究会, 愛知, 2012 年 10 月.

Y. NOMURA and T. FUJI, "Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation", *UFO IX*, Tu3.6 (2013).

H. SAKURAI, "Unusual Reactivity of Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters toward C-X Bond Activation", Workshop on Novel Catalytic Systems and Innovative Nanomaterials, Institute for Molecular Science, Okazaki(Japan), April 2012.

S. HIGASHIBAYASHI, "C_3 Symmetric Buckybowls, Sumanenes", Kathmandu Symposia on Advanced Materials 2012, Kathmandu(Nepal), May 2012.

櫻井英博,「金クラスター触媒によるカップリング反応」, 第 45 回有機金属若手の会夏の学校, 山梨, 2012 年 7 月.

H. SAKURAI, Qi-Tao Tan, S. HIGASHIBAYASHI, "Chemical Synthesis of Nitrogen-doped Buckybowls", 8th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 22th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Xi'an(China), October 2012.

櫻井英博,「擬均一系クラスター触媒の有機合成的アプローチ」, 第 9 回触媒相模セミナー, 神奈川, 2012 年 11 月.

櫻井英博,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の化学」, 奈良先端未来開拓コロキウム 2012, 奈良, 2012 年 12 月.

加藤晃一,「糖鎖機能解明への分子科学的アプローチ」, 山手イブニングセミナー, 愛知, 2012 年 5 月.

矢木宏和, 石本和大, 廣本武史, 藤田宏明, 水島恒裕, 植草義徳, 矢木真穂, 栗本英治, 野田勝紀, 内山進, 徳永文稔, 岩井一宏, 加藤晃一,「非典型的な UBA-UBL 相互作用が介在する直鎖状ポリユビキチン鎖を生成する E3 リガーゼ複合体」, 第 76 回日本生化学会中部支部例会・シンポジウム, 愛知, 2012 年 5 月.

山口拓実, Zhang Ying, 山本さよこ, 加藤晃一,「常磁性 NMR 分光法と分子動力学計算を組み合わせた糖鎖の動的立体構造解析」, 第 39 回生体分子科学討論会, 仙台, 2012 年 6 月.

加藤晃一, 矢木宏和, 神谷由紀子, 佐藤匡史,「タンパク質の機能拡張子としての糖鎖を観る」, 第 12 回日本蛋白質科学会年会, 愛知, 2012 年 6 月.

K. KATO, "Structural glycomics approaches for characterization of biotherapeutics and their application to atomic anatomy of antibodies," BioChina 2012, Shanghai (China), June 2012.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO and K. KATO, "Oligosaccharide conformational dynamics analyses by using PCS in conjunction with MD simulation," The 26th International Carbohydrate Symposium (ICS2012), Madrid (Spain), July 2012.

Y. UEKUSA, S. SONNINO and K. KATO, "NMR analysis of specific carbohydrate-carbohydrate interaction between gangliosides," The 26th International Carbohydrate Symposium (ICS2012), Madrid (Spain), July 2012.

K. KATO, "Structural views of carbohydrate-protein interaction systems as potential therapeutic targets," The 26th International Carbohydrate Symposium (ICS2012), Madrid (Spain), July 2012.

加藤晃一, 「NMR を利用したタンパク質・複合糖質の揺らぎの検出とその機能連関の探査」, 新学術領域「揺らぎと生体機能」平成 24 年度合同会議, 宮城, 2012 年 7 月.

植草義徳, 加藤晃一,「NMR を利用したガングリオシド糖鎖間相互作用の観測」, 糖鎖科学中部拠点 第 10 回「若手の力」フォーラム, 静岡, 2012 年 9 月.

K. KATO, "High Resolution Analysis of Protein Glycosylation," 日本製薬工業協会 バイオ医薬品委員会, 東京, 2012 年 9 月.

加藤晃一,「ATP 非依存性シャペロンの構造ダイナミクスと機能発現メカニズム」, 新学術領域「揺らぎと生体機能」「水和と ATP」合同公開シンポジウム「ゆらぎと水－生命のエネルギーと分子機構を探る」, 大阪, 2012 年 9 月.

山口拓実, Zhang Ying, 山本さよこ, 亀田倫史, 加藤晃一, 「分子動力学計算と常磁性 NMR 法による糖鎖の立体構造揺らぎの評価」, 新学術領域「揺らぎと生体機能」「水和と ATP」合同公開シンポジウム「ゆらぎと水－生命のエネルギーと分子機構を探る」, 大阪, 2012 年 9 月.

柳浩太郎, 神谷由紀子, 千葉靖典, 喜多島敏彦, 地神芳文, 加藤晃一,「超高磁場 NMR 法を用いた高マンノース型糖鎖の構造解析」, 第 31 回日本糖質学会年会, 鹿児島, 2012 年 9 月.

植草義徳, 加藤晃一, 「NMR 法を用いたガングリオ複合体における特異的な糖質間相互作用の解析」, 第 31 回日本糖質学会年会, 鹿児島, 2012 年 9 月.

山口拓実, Zhang Ying, 山本さよこ, 亀田倫史, Erdélyi Máte, Griesinger Christian, 加藤晃一, 「常磁性 NMR 法による糖鎖の動的立体構造解析」, 第 31 回日本糖質学会年会, 鹿児島, 2012 年 9 月.

矢木真穂, Pornthip Boonsri, 山口芳樹, 加藤晃一, 「NMR 法を用いたザルコトキシン IA とリピド A との相互作用解析」, 第 31 回日本糖質学会年会, 鹿児島, 2012 年 9 月.

K. INAGAKI, Y. UEKUSA, Y. KAMIYA, T. SATOH and K. KATO, 「酸化還元状態に依存してプロテインジスルフィドイソメラーゼの基質結合部位ドメインの空間配置が変化する仕組み」, 第 50 回日本生物物理学会年会, 愛知, 2012 年 9 月.

M. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA, "HD-exchange motion of free heptameric GroES studied by the use of TROSY and DMSO quenching followed by 2D NMR," 第 50 回日本生物物理学会年会, 愛知, 2012 年 9 月.

加藤晃一,「糖鎖改変による抗体医薬の機能向上の構造基盤」, 第 4 回糖鎖科学中部拠点研究会, 愛知, 2012 年 10 月.

矢木真穂, 「アミロイド β の構造転移と分子間相互作用」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー・包括脳ネットワーク研究会「第 3 回神経科学と構造生物学の融合研究会」, 大阪, 2012 年 10 月.

K. KATO, "NMR of glycoproteins," Pharmaceutical NMR Lecture Series in Osaka, 大阪, 2012 年 10 月.

M. YAGI-UTSUMI, P. BOONSRI, Y. YAMAGUCHI and K. KATO, "NMR analyses of the conformational transition of the antibacterial peptide sarcotoxin IA interacting with lipid A," 4th Asian Communications of Glycobiology and Glycotechnology (ACGG 2012 Conference), Jeju (Korea), October 2012.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO, Y. UEKUSA and K. KATO, "Paramagnetic-assisted NMR analyses of conformational dynamics of gangliosides," 4th Asian Communications of Glycobiology and Glycotechnology (ACGG 2012 Conference), Jeju (Korea), October 2012.

K. YANAGI, Y. KAMIYA, T. KITAJIMA, T. YAMAGUCHI, Y. CHIBA and K. KATO, "Comparative conformational analysis of high-mannose-type oligosaccharides using high-field NMR spectroscopy combined with ^{13}C-labeling technique," 4th Asian Communications of Glycobiology and Glycotechnology (ACGG 2012 Conference), Jeju (Korea), October 2012.

R. TAKEUCHI, S. SATO, M. YAGI, Y. YAMAGUCHI, K. KATO and M. FUJITA, "Induction of residual dipolar coupling by aggregates of magnetically aligning self-assembled complexes," 第 51 回 NMR 討論会, 愛知, 2012 年 11 月.

山口拓実, Zhang Ying, 山本さよこ, 亀田倫史, 加藤晃一, 「常磁性効果を応用した糖鎖の動的立体構造解析」, 第 51 回 NMR 討論会, 愛知, 2012 年 11 月.

矢木真穂, 山口拓実, 植草義徳, 加藤晃一, 「NMR 法による神経変性疾患関連タンパク質とガングリオシドクラスターとの相互作用解析」, 第 34 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム, 京都, 2012 年 11 月.

T. YAMAGUCHI, Y. ZHANG and K. KATO, "NMR spectroscopic approaches to the conformational dynamics of oligosaccharides by paramagnetic tagging," The First International Symposium on Biofunctional Chemistry (ISBC2012), Tokyo (Japan), November 2012.

K. KATO, "Conformational dynamics and interactions of glycoconjugates of therapeutic interest," Commemorative Symposium on the 20th Anniversary of the Mizutani Foundation for Glycoscience, Tokyo (Japan), November 2012.

加藤晃一,「複合糖質の構造生物学 : 創薬標的としての糖鎖」, 第 40 回構造活性相関シンポジウム, 愛知, 2012 年 11 月.

K. KATO, "High Resolution Analysis of Protein Glycosylation," CASSS CMC Strategy Forum Japan 2012, Tokyo (Japan), December 2012.

K. KATO, "NMR characterization of conformational fluctuations of oligosaccharides and glycoconjugates," The 6th International Symposium, Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto (Japan), December 2012.

T. KUNIHARA, M. YAGI-UTSUMI, T. NAKAMURA, K. KUWAJIMA and K. KATO, "Multiple binding models in molecular recognition process of GroEL as studied by NMR spectroscopy," The 6th International Symposium, Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto (Japan), December 2012.

K. INAGAKI, Y. UEKUSA, Y. KAMIYA, T. SATOH and K. KATO, "Redox-dependent conformational dynamics of protein disulfide isomerase coupled with exposure of its substrate binding region," The 6th International Symposium, Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto (Japan), December 2012.

Y. UEKUSA, Y. ZHANG, K. YANAGI, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Conformations, dynamics, and interactions of sugar chains as studied by NMR spectroscopy," The 6th International Symposium, Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto (Japan), December 2012.

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA, "Hydrogen-deuterium (H/D) exchange studies on free GroES and the GroEL-SR1-ADP chaperonin complex," The 6th International Symposium, Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto (Japan), December 2012.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO and K. KATO, "Characterization of conformational dynamics of branched oligosaccharides by using paramagnetic NMR techniques," 9th SOKENDAI Student Seminar (Life Science Retreat 2012), 静岡, 2012 年 12 月.

加藤晃一, 「生体分子の自己組織化プロセスの精密構造解析」, CREST「ナノ界面技術の基盤構築」研究領域第 2 回公開シンポジウム「ナノ界面が生み出す次世代機能」, 東京, 2012 年 12 月.

加藤晃一, 「複合糖質の立体構造・ダイナミクス・相互作用」, 第 85 回日本生化学会大会, 福岡, 2012 年 12 月.

K. YANAGI, Y. KAMIYA, T. KITAJIMA, T. YAMAGUCHI, Y. CHIBA and K. KATO, "Comparative conformational analysis of high-mannose-type oligosaccharides using high-field NMR spectroscopy combined with ^{13}C-labeling technique," SOKENDAI Asian Winter School Frontiers in Photo-Molecular Science, Okazaki (Japan), January 2013.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "NMR Spectroscopic Characterization of the Pathogenic Interaction of Amyloid β Peptide with GM1 Clusters," Pure and Applied Chemistry International Conference 2013 (PACCON 2013), Chon Buri, (Thailand), January 2013.

T. YAMAGUCHI, Y. ZHANG and K. KATO, "Paramagnetic Lanthanide-tagging for NMR Conformational Characterization of Glycolipids," Pure and Applied Chemistry International Conference 2013 (PACCON 2013), Chon Buri, (Thailand), January 2013.

K. KATO, "Structural Views of Carbohydrate-Protein Interaction Systems as Potential Therapeutic Targets," Pure and Applied Chemistry International Conference 2013 (PACCON 2013), Chon Buri, (Thailand), January 2013.

P. BOONSRI, R. THAMMAPORN, K. CHOOWONGKOMOL, K. KATO and S. HANNONGBUA, "Structural and Dynamics Properties of HIV-1 Reverse Transcriptase Induced by Non-Nucleoside Inhibitors (NNRTIs) Based on Molecular Docking and NMR Studies," Pure and Applied Chemistry International Conference 2013 (PACCON 2013), Chon Buri, (Thailand), January 2013.

T. YAMAGUCHI and K. KATO, "NMR approaches to the molecular basis of oligosaccharide functions," 2013 Asian Core Winter School, Busan (Korea), January 2013.

Zhang Ying, 山口拓実, 山本さよこ, 植草義徳, 矢木真穂, 加藤晃一, "Paramagnetic NMR approaches for characterization of conformational dynamics and interactions of oligosaccharides, " 日本生物物理学会中部支部講演会, 愛知, 2013 年 2 月.

大川慶祐, 矢木宏和, 植草義徳, 矢木真穂, 水島恒裕, 佐藤匡史, 佐伯　泰, 田中啓二, 加藤晃一, 「プロテアソームを構成するサブユニットとその集合因子 Ump1p の相互作用解析」, 日本生物物理学会中部支部講演会, 愛知, 2013 年 2 月.

K. KATO, "Conformational dynamics and interactions of oligosaccharides in physiological and pathological contexts," Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, Y. UEKUSA and K. KATO, "NMR approaches for characterizing molecular recognition process of intrinsically disordered proteins," Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, J. CHEN, K. KATO and K. KUWAJIMA, "Structural fluctiuations of free GroES and the GroES bound to the single-ring cchaperonin SR1 studied by hydrogen/deuterium exchange and 2D NMR," Fifth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, High1 Resort (Korea), February 2013.

K. KATO, "Molecular and structural basis for N-glycan-dependent determination of glycoprotein fates in cells," Glycobiology Gordon Research Conference, Ventura (USA), March 2013.

加藤晃一, 「NMR による糖鎖クラスターのダイナミクスと相互作用の解析」, 糖鎖集合状態の変化による幹細胞近接場制御についての討論会, 愛知, 2013 年 3 月.

加藤晃一, 「NMR と SANS によるタンパク質の動的構造解析」, 中性子連携研究会, 東京, 2013 年 3 月.

竹内良介, 佐藤宗太, 矢木真穂, 山口拓実, 山口芳樹, 加藤晃一, 藤田　誠,「磁場配向性錯体の階層的自己組織化を利用した残余磁気双極子相互作用の誘起と制御」, 日本化学会第 93 回春季年会, 滋賀, 2013 年 3 月.

佐藤匡史, 植草義徳, 廣本武史, 矢木真穂, 矢木宏和, 水島恒裕, 佐伯　泰, 田中啓二, 加藤晃一, 「プロテアソーム集合因子 Nas2 を介したプロテアソームの分子集合機構の構造基盤」, 日本薬学会　第 133 回年会, 横浜, 2013 年 3 月.

K. KUWAJIMA, "The structure and function of HAMLET and its related protein complexes," The 3rd HAMLET Conference, Lund University, Lund(Sweden), December 2012.

K. KUWAJIMA, "Structural fluctuations and functional expression of the chaperonin complexes," The 6th International Symposium Molecular Science of Fluctuations toward Biological Functions, Kyoto(JAPAN), December 2012.

桑島邦博,「シャペロニン超分子複合体の水素交換反応」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「分子シャペロンの機能発現の新展開と細胞制御」, 大阪, 2012 年 11 月.

K. KUWAJIMA, "Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes," The 12th KIAS Conference on Protein Structure, Korea Institute for Advanced Study, Seoul(Korea), October 2012.

K. KUWAJIMA, "Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes," IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2012, Aichi(JAPAN), September 2012.

T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. AIZAWA, K. KAWANO, M. DEMURA, and K. KUWAJIMA, "Structure and biological function of anti-tumor complexes between oleic acid and proteins in the molten globule state," 4th Japan-Korea Seminar on Biommolecular Sciences-Experiments and Simulations, Cultural Center of Todaiji-Temple, Nara(JAPAN), January 2012.

平成25年度研究報告一覧

１．学術論文　（50報）

M. WATANABE, S. TAKEMURA, S. KAWAKAMI, E. SYOUNO, H. KUROSU, M. HARADA, M. IIDA, "Sites of protonation and copper(II)-complexation in protic ionic liquids comprised of N-hexylethylenediaminium cation," *J. Mol. Liq*, **183**, 50-58(2013) .

Y. YOSHIDA, Y. MAWATARI, A. MOTOSHIGE, R. MOTOSHIGE, T. HIRAOKI, M. WAGNER, K. MŰLLEN and M. TABATA, "Accordion-like Oscillation of Contracted and Stretched Helices of Polyacetylenes Synchronized with the Restricted Rotation of Side Chains, " *J. Am. Chem. Soc*, **135**, 4110-4116 (2013).

Y. YOSHIDA, Y. MAWATARI, A. MOTOSHIGE, R. MOTOSHIGE, T. HIRAOKI, T. HIRAOKI, "Helix oscillation of polyacetylene esters detected by dynamic 1H NMR, IR, and UV-vis methods in solution," *Polym. Chem*, **4**, 2982-2988 (2013).

E. HASEGAWA, E. TOSAKA, A. YONEOKA, Y. TAMURA, S. TAKIZAWA, M. TOMURA and Y. YAMASHITA, "Photoinduced Electron Transfer Reaction of α-Bromomethyl Substituted Benzocyclic β-Keto Esters with Amines: Selective Reaction Pathways Depending on Nature of Amine Radical Cations," *Res. Chem. Intermed*. **39**, 247-267 (2013).

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Circular Dichroism Nano-Imaging of Two-Dimensional Metal Nanostructures," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 13805-13809 (2013).

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Strong Nanoscale Optical Activity Localized in Two-Dimensional Chiral Metal Nanostructures," *J. Phys. Chem. C.* **117**, 23964-23969 (2013).

T. KURAHASHI and H. FUJII, "Unique Ligand Radical Character of an Activated Cobalt Salen Catalyst that is Generated by Aerobic Oxidation of a Cobalt(II) Salen Complex," *Inorg. Chem.* **52**, 3908-3919 (2013).

C. WANG, T. KURAHASHI, K. INOMATA, M. HADA and H. FUJII, "Oxygen-Atom Transfer from Iodosylarene Adducts of a Manganese(IV) Salen Complex: Effect of Arenes and Anions on I(III) of the Coordinated Iodosylarene", *Inorg. Chem.* **52**, 9557-9566 (2013).

T. ASAKURA, K. YAZAWA, K. HORIGUCHI, F. SUZUKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIYAMA, H. KAJI, "Difference in the structures of alanine tri- and tetra-peptides with antiparallel β-sheet assessed by X-ray diffraction, solid-state NMR and chemical shift calculations by GIPAW," *Biopolymers*, **101**, 13-20 (2014).

T. ASAKURA, F. SUZUKI, K. YAZAWA, A. AOKI, Y. NISHIYAMA, K. NISHIYAMA, F. SUZUKI, H. KAJI, "Determination of Accurate ^{1}H Positions of (Ala-Gly)n as a Sequential Peptide Model of Bombyx mori Silk Fibroin before Spinning (Silk I)," *Macromolecules*. **46**, 8046-8050 (2013).

M. TANIO and K. NISHIMURA, "Intramolecular allosteric interaction in the phospholipase C-δ1 pleckstrin homology domain," *Biochim. Biophys. Acta.* **1834**, 1034-1043(2013).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Molecular Orientation and Electronic States of Vanadyl-phthalocyanine on Si(111) and Ag(111) Surfaces," *J. Phys. Chem.C.* **117**, 22843-22851 (2013).

T. YOKOYAMA and K. EGUCHI, "Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/ Anti-Invar Effects in MnNi Alloy," *Photon Factory Activity Report Part A: Highlights and Facility Report 2012*, 22-23 (2013).

T. YOKOYAMA and K. EGUCHI, "Invar 合金の非熱膨張特性の起源解明," *PF News* **31**, 14-18 (2013).

K. EGUCHI, Y. TAKAGI, T. NAKAGAWA and T. YOKOYAMA, "Passivating effect of Si(111)-(√3×√3)Ag and Si3N4/Si(111)-(8×8) buffer layers," *J. Phys. Conf. Ser.* **430**, 012129 (2013).

Y. FURUTANI, T. OKITSU, L. REISSIG, M. MIZUNO, M. HOMMA, A. WADA, Y. MIZUTANI, Y. SUDO, "Large Spectral Change Due to Amide Modes of a β-Sheet upon the Formation of an Early Photointermediate of Middle Rhodopsin," *J. Phys. Chem. B* **117**, 3449-3458 (2013).

H. GUO, T. Kimura, Y. FURUTANI, "Distortion of the Amide-I and -II Bands of an α-helical Membrane Protein, pharaonis Halorhodopsin, Depends on Thickness of Gold Films Utilized for Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy," *Chem. Phys.* **419**, 8-16 (2013).

Y. FURUTANI, T. KIMURA, K. OKAMOTO, "Development of a Rapid Buffer-Exchange System for Time-Resolved ATR-FTIR Spectroscopy with the Step-Scan Mode," *BIOPHYSICS* **9**, 123-129 (2013).

S. JIN, K. FURUKAWA, M. ADDICOAT, L. CHEN, T. SEIYA, S. IRLE, T. NAKAMURA and D. JIANG, "Large Pore Donor–Acceptor Covalent Organic Frameworks," *Chemical Science,* in press DOI:10.1039/C3SC52034J (2013).

Y. FUNASAKO, T. INAGAKI, T. MOCHIDA, T. SAKURAI, H. OHTA, K. FURUKAWA and T. NAKAMURA, " Organometallic Ionic Liquids from Octamethylferrocenium Cations. Preparation, Thermal Properties, Crystal Structures, and Magnetic Properties," *Dalton Trans.* **42**, 8317-8327 (2013).

S. JIN, X. DING, X. FENG, M. SUPUR, K. FURUKAWA, S. TAKAHASHI, M. ADDICOAT, M. E. EL-KHOULY, T. NAKAMURA, S. IRLE, S. FUKUZUMI, A. NAGAI and D. JIANG, "Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions," *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 2017-2021 (2013).

Y. MORINAKA, S. SATO, A. WAKAMIYA, H. NIKAWA, N. MIZOROGI, F. TANABE, M. MURATA, K. KOMATSU, K. FURUKAWA, T. KATO, S. NAGASE, T. AKASAKA and Y. MURATA, "X-ray observation of a helium atom and placing a nitrogen atom inside He@C60 and He@C70Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions," *Angew. Nat. Commun.* **4**, 1554-1559 (2013).

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, A. MUKAIYAMA, T.K. CHAUDHURI, K. KATO and K. KUWAJIMA, "The H/D-exchange kinetics of the Escherichia coli co-chaperonin GroES studied by 2D NMR and DMSO-quenched exchange methods," *J. Mol. Biol.* **425**, 2541-2560 (2013).

A. MUKAIYAMA, T. NAKAMURA, K. MAKABE, K. MAKI, Y. GOTO and K. KUWAJIMA, "Native-state heterogeneity of β2-microglobulin as revealed by kinetic folding and real-time NMR experiments," *J. Mol. Biol.* **425**, 257-272 (2013).

T. NAKAMURA, T. AIZAWA, R. KARIYA, S. OKADA, M. DEMURA, K. KAWANO, K. MAKABE and K. KUWAJIMA, "Molecular mechanisms of the cytotoxicity of human α-lactalbumin made lethal to tumor cells (HAMLET) and other protein-oleic acid complexes," *J. Biol. Chem.* **288**, 14408-14416 (2013).

K. NAKATANI, H. ISHIKAWA, S. AONO and Y. MIZUTANI, "Heme-binding properties of heme detoxification protein from Plasmodium falciparum," *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **439**, 477-480 (2013).

S.KUNISHIGE, M.KAWABATA, M.BABA, T.YAMANAKA, Y.MORITA, S. HIGASHIBAYASHI and H.SAKURAI, "Jet spectroscopy of buckybowl: Electronic and vibrational structures in the S0 and S1 states of triphenylene and sumanene, " *J. Chem. Phys.* **139**, 044313-044321 (2013).

Y. NOMURA, H. SHIRAI, and T. FUJI, "Frequency-resolved optical gating capable of carrier-envelope phase determination, " *Nat. Commun.* **4**, 2820 (2013).

Y. NOMURA, Y.-T. WANG, T. KOZAI, H. SHIRAI, A. YABUSHITA, C. W. LUO, S. NAKANISHI, and T. FUJI, "Single-shot detection of mid-infrared spectra by chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases," *Opt. Express* **21**, 18249-18254 (2013).

J. MACK, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and N. KOBAYASHI, "Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy and Electronic Structures of C_3 Symmetry Buckybowls", *Chem. Phys. Lett.* **556**, 188-194 (2013).

S. KARANJIT, K. BOBUATONG, R. FUKUDA M. EHARA and H. SAKURAI, "Mechanism of the aerobic oxidation of methanol to formic acid on Au_8^-: A DFT study", *Int. J. Quant. Chem.* **113**, 428-436 (2013).

R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK, Y. SATO and H. SAKURAI, "Aryl Iodides as Strong Inhibitor for Gold and Gold-Based Bimetallic quasi-Homogeneous Catalysis", *Chem. Commun*. **49**, 2542-2544 (2013).

B. M. SCHMIDT, B. TOPOLINSKI, S. HIGASHIBAYASHI, T. KOJIMA, M. KAWANO, D. LENTZ and H. SAKURAI, "The Synthesis of Hexaflorosumanene and its Congeners", *Chem. Eur. J.* **19**, 3282-3286 (2013).

B. B. SHRESTHA, S. KARANJIT, G. PANDA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Synthesis of Substituted Sumanenes by Aromatic Electrophilic Substitution Reactions", *Chem. Lett.* **42**, 386-388 (2013).

K. MAEYAMA, T. TSUKAMORO, M. SUZUKI, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Nanosized Palladium-Catalyzed Suzuki-Miyaura Coupling Polymerization: Synthesis of Soluble Aromatic Poly(ether ketone)s", *Polymer J.* **45**, 401-405 (2013).

S. HIGASHIBAYASHI, S. ONOGI, H. K. SRIVASTAVA, G. N. SASTRY, Y. T. WU and H. SAKURAI, "Stereoelectronic Effect of Curved Aromatic Structure Favouring the Unexpected *Endo* Conformation of Benzylic Substituted Sumanene", *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**, 7314-7316 (2013).

S. KUNISHIGE, M. KAWABATA, M. BABA, T. YAMANAKA, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI and H. SAKURAI, "Jet spectroscopy of buckybowl: Electronic and vibrational structures in the S0 and S1 states of triphenylene and sumanene", *J. Chem. Phys.* **139**, 044313-044321 (2013).

B. TOPOLINSKI, B. M. SCHMIDT, S. HIGASHIBAYASHI, H. SAKURAI and D. LENTZ, "Sumanenylferrocenes and their solid state self-assembly," *Dalton Trans.* **42**, 13809-13812 (2013).

B. M. SCHMIDT, B. TOPOLINSKI, M. YAMADA, S. HIGASHIBAYASHI, M. SHIONOYA, H. SAKURAI and D. LENTZ, "Fluorinated and Trifluoromethylated Corannulenes", *Chem. Eur. J.* **19**, 13872-13880 (2013).

R. N. DHITAL, C. KAMONSATIKUL, E. SOMSOOK and H. SAKURAI, "Bimetallic Gold/Palladium Alloy Nanoclusters: An Effective Catalyst for Ullmann Coupling of Chloropyridines under Ambient Conditions", *Catal. Sci. Tech*. **3**, 3030-3035 (2013).

S. HAESUWANNAKIJ, W. KARUEHANON, V. L. MISHRA, H. KITAHARA, H. SAKURAI, S. KANAOKA, S. AOSHIMA, "Size-Controlled Preparation of Gold Nanoclusters Stabilized by Hydrophilic Polymers with High Viscosity Using Micro-flow Reactor", *Monatsch. Chem*. **145**, 23-28 (2014).

J. I. FUJITA, M. TACHI, K. MURAKAMI, H. SAKURAI, Y. MORITA, S. HIGASHIBAYASHI, M. TAKEGUCHI, "Beam-induced graphitic carbon cage transformation from sumanene aggregates", *Appl. Phys. Lett.* **104**, 043107-043112 (2014).

T. YAMAGUCHI, Y. KAMIYA, Y. M. CHOO, S. YAMAMOTO and K. KATO, "Terminal spin labeling of a high-mannose-type oligosaccharide for quantitative NMR analysis of its dynamic conformation," *Chem. Lett.* **42**, 544-546 (2013).

M. YAGI-UTSUMI, T. KUNIHARA, T. NAKAMURA, Y. UEKUSA, K. MAKABE, K KUWAJIMA and K. KATO, "NMR characterization of the interaction of GroEL with amyloid β as a model ligand," *FEBS Lett.* **587**, 1605-1609 (2013).

N. NISHIDA, M. YAGI-UTSUMI, F. MOTOJIMA, M. YOSHIDA, I. SHIMADA AND K. KATO, "Nuclear magnetic resonance approaches for characterizing interactions between the bacterial chaperonin GroEL and unstructured proteins," *J. Biosci. Bioeng.* **116**, 160-164 (2013).

M. S. CHANDAK, T. NAKAMURA, K. MAKABE, T. TAKENAKA, A. MUKAIYAMA, T. K. CHAUDHURI, K. KATO AND K. KUWAJIMA, "The H/D-exchange kinetics of the *Escherichia coli* co-chaperonin GroES studied by 2D NMR and DMSO-quenched exchange methods," *J. Mol. Biol.* **425**, 2541-2560 (2013).

M. SUGIYAMA, H. YAGI, T. YAMAGUCHI, K. KUMOI, M. HIRAI, Y. OBA, N. SATO, L. PORCAR, A. MARTELE and K. KATO, "Conformational characterization of a protein complex involving intrinsically disordered protein by small-angle neutron scattering using the inverse contrast matching method: a case study of interaction between α-synuclein and PbaB tetramer as a model chaperone," *J. Appl. Cryst.* **47**, 430-435 (2014).

Y. UEKUSA, K. OKAWA, M. YAGI-UTSUMI, O. SERVE, Y. NAKAGAWA, T. MIZUSHIMA, H. YAGI, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "Backbone ^{1}H, ^{13}C, and ^{15}N assignments of yeast Ump1, an intrinsically disordered protein that functions as a proteasome assembly chaperone, " *Biomol. NMR Assign.* in press (2014).

T. SATOH, K. SUZUKI1, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Structural basis for disparate sugar-binding specificities in the homologous cargo receptors ERGIC-53 and VIP36," *PLoS ONE* in press (2014).

T. DOI, M. YOSHIDA, K. OHSAWA, K. SHIN-YA, M. TAKAGI, Y. UEKUSA, T. YAMAGUCHI, K. KATO, T. HIROKAWA and T. NATSUME, "Total synthesis and characterization of thielocin B1 as a protein–protein interaction inhibitor of PAC3 homodimer, " *Chem. Sci.* in press (2014).

２．学会発表 （134件）

石田尚也，小湊千種，秋津貴城，許斐太郎，加藤政博,「含アゾ基キラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II) 錯体複合材料の波長選択 UV 円偏光誘起分子配向と TD-DFT による解釈」，スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」，愛知，2014 年 1 月．

小湊千種，石田尚也，秋津貴城，許斐太郎，加藤政博,「アゾベンゼンとキラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体複合系の波長選択 UV 円偏光誘起分子配向と TD-DFT による解釈」，スーパーコンピュータワークショップ「計算化学の最新の成果と展開」，愛知，2014 年 1 月．

石田尚也，秋津貴城,「含アゾ基キラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体の直線・円偏光誘起分子配向」，錯体化学会第 63 回討論会，沖縄, 2013 年 11 月．

小湊千種，秋津貴城,「アゾベンゼンとキラルシッフ塩基 Ni(II), Cu(II), Zn(II)錯体複合材料の偏光誘起分子配向と双極子モーメント」，錯体化学会第 63 回討論会，沖縄，2013 年 11 月．

須永将光，古谷昌平，伊藤舞子，小湊千種，秋津貴城,「キラルシッフ塩基 Co(II)錯体とアゾ色素複合系の円偏光照射によるキラル秩序形成の解釈」，第 3 回 CSJ 化学フェスタ，東京，2013 年 10 月．

C. KOMINATO, T. AKITSU, "Photoinduced molecular orientation of catalytic-like chiral Schiff base metal complexes having azo-groups in polymer and metalloprotein (laccase) matrices, " International Conference on BioInorganic Chemistry ICBIC 16, Grenoble(France), July 2013.

小松裕貴, 橋本将大, 満身 稔, 鳥海幸四郎, 坏 広樹, 山田順一, 中辻慎一, 東 信晃, 宮崎裕司,「一次元ロジウムージオキソレン錯体の構造相転移と導電性, 磁性」, 平成25年度 日本結晶学会, 熊本, 2013年 10 月.

平松孝章, 清水康弘, 前里光彦, 大塚晃弘, 矢持秀起, 吉田幸大, 齋藤軍治,「ダイヤモンド型スピン系(ET)Ag_4(CN)$_5$の反強磁性秩序」, 日本化学会第 94 春季年会, 愛知, 2014 年 3 月.

依力哈木, 戸村正章, 小野克彦,「拡張型ビチオフェン誘導体のホウ素キレートによる機能化と物性調査」, 第 24 回基礎有機化学討論会, 東京, 2013 年 9 月.

竹村 忍, 原田雅史, 飯田雅康,「キレートアミン型プロトン性イオン液体と銅(II)塩との相互作用に及ぼす対イオンの効果」, 第 4 回イオン液体討論会, 横浜, 2013 年 11 月.

植田一正, 草薙弘樹, 南保宏貴, 河野芳海, 宮林恵子, 江上智恵,「メトキシカルボニル置換 2,5−ジ(1,3−ジチオール−2−イリデン)−1,3−ジチオラン−4−チオン誘導体の合成と固体での光物性」, 日本化学会第 94 春季年会, 愛知, 2014 年 3 月.

牧田賢彦, 井村考平,「チューブ状シアニン J 会合体の近接場顕微分光」, 第 7 回分子科学討論会, 京都, 2013 年 4 月.

吉田嘉晃, 元茂朝日, 元茂蘭子, 佐々木隆浩, 馬渡康輝, 田畑昌祥, 第 62 回高分子討論会, 金沢, 2013 年 9 月.

覚野祐樹, 満身 稔, 鳥海幸四郎, 安田伸広,「多孔性ポルフィリン亜鉛錯体の合成と構造」,錯体化学会第 63 回討論会, 沖縄, 2013 年 11 月.

小川法子, 瀬藤敬太, 生田直子, 上梶友記子, 中田大介, 寺尾啓二, 川島嘉明, 山本浩充,「R−α リポ酸と β−シクロデキストリンの包接複合体の単結晶 X 線構造解析」第 30 回シクロデキストリンシンポジウム, 熊本, 2013 年 9 月.

川瀬正成, 小柳津航, 秦 健, 濱中 泰, 葛谷俊博,「コロイド合成法で作製した Cu_2ZnSnS_4 ナノ粒子の光学特性Ⅲ」, 日本物理学会第 69 回年次大会, 神奈川, 2014 年 3 月.

葛谷俊博, 小柳津航, 濱中 泰, 川瀬正成,「Cu2ZnSnS4 ナノ粒子の光学特性の組成依存性」,分子・物質合成プラットフォーム平成２５年度シンポジウム, 茨城県, 2014 年 3 月.

今枝優太, 平野慎二, 戸村正章, 西田純一, 山下敬郎, 小野克彦,「N−Boc ピロール誘導体を用いた熱変換型有機半導体の研究開発」, 日本化学会第 93 春季年会, 滋賀, 2013 年 3 月.

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, "Nanoscale Strong Optical Activity of Metallic Nanostructures," A Peter Wall Colloquium Abroad and The 73rd Okazaki Conference on "Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics", Okazaki (Japan), October 2013.

橋谷田俊, 成島哲也, 岡本裕巳,「アキラルな 2 次元金ナノ構造体における局所光学活性」, 日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2013, 奈良, 2013 年 11 月.

成島哲也, 橋谷田俊, 岡本裕巳,「キラルな金属ナノ構造が示す巨視および微視的な光学活性」, 第 7 回分子科学討論会, 京都, 2013 年 9 月.

成島哲也,「キラルな２次元金属ナノ構造に発現するナノ空間の強い光学活性」, 第 3 回光科学異分野横断萌芽研究会, 神奈川, 2013 年 8 月.

Zhiqi Cong, 柳澤幸子, 倉橋拓也, 小倉尚志, 藤井 浩,「ハロペルオキシダーゼの活性反応中間体としての鉄 3 価ヘム次亜塩素酸錯体の電子構造と反応性」, 第 40 回生体分子科学討論会, 大阪府, 2013 年 6 月.

H. FUJII, "Synthesis, Characterization, and Reactivity of Hypochlorito-Iron(III) Porphyrin Complexes," 16th International Conference on Bioinorganic Chemistry, Grenoble (France), July 2013.

Zhiqi Cong, 柳澤幸子, 倉橋拓也, 小倉尚志, 藤井 浩,「鉄 3 価ヘム次亜塩素酸イオン付加錯体の合成, 電子構造, 反応性」, 第 63 回錯体化学討論会, 沖縄県, 2013 年 11 月.

倉橋拓也, 藤井 浩,「キラルなサレンマンガン錯体を用いた立体選択的なジオキソ架橋 2 核錯体の生成機構の研究」, 第 63 回錯体化学討論会, 沖縄, 2013 年 11 月.

H. FUJII, "Synthesis, Characterization, and Reactivity of Iodosylarene Adducts of a Chiral Manganese Salen Complex," 4th Asian Conference on Coordination Chemistry, Grenoble (France), November 2013.

藤井 浩,「高原子価鉄オキソヘム錯体による酸化反応と反応性制御機構」, 第 46 回酸化反応討論会, 茨城, 2013 年 11 月.

倉橋拓也, 藤井 浩,「サレンマンガン-ヨードソアレーン付加錯体の物性と反応性」,第 46 回酸化反応討論会, 茨城, 2013 年 11 月.

M. TANIO and K. NISHIMURA,「NMR analysis of intramolecular allostery in the PLC-δ1 PH domain」, 第 52 回 NMR 討論会, 金沢, 2013 年 11 月.

T. ASAKUARA, K. YAZAWA, K. OKUSHITA, Y. SUZUKI, Y. NAKAZAWA, A. AOKI, K. NISHIMURA, Y. NISHIYAMA, H. KAJI,「固体 NMR による家蚕絹の繊維化前および繊維化後の構造決定」, 第 52 回 NMR 討論会, 金沢, 2013 年 11 月.

M. TANIO, and K. NISHIMURA, "Intramolecular allostery in the PLC-δ1 PH domain," 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都, 2013 年 11 月.

K. AKAI, M. TANIO, K. NISHIMURA, S. TUZI, "Role of tryptophan residues in membrane association of the SWAP-70 PH domain," 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都, 2013 年 11 月.

K. OGATA, S. SASA, M. INOUE, M. YANO, and K. NISHIMURA, "^{1}H solid-state NMR characterization of aqueous grown ZnO nanorods with different growth temperatures," 16th International Conference on II-VI Compound and Related Materials (II-VI 2013), Nagahama (Japan), September 2013.

朝倉哲郎, 矢澤宏次, 西村勝之, 奥下慶子, 中澤靖元, 梶弘典,「各種固体 NMR を用いた家蚕絹繊維化前後の精密固体構造の決定」, 第 62 回高分子討論会, 金沢, 2013 年 9 月.

矢澤宏次, 大畑卓也, 西山祐介, 西村勝之, 朝倉哲郎,「高分解能 ^{1}H 固体 NMR を用いた生体分子の分子間構造解析」, 第 18 回高分子分析討論会, 東京, 2013 年 9 月.

K. YAZAWA, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA, H. KAJI, T. ASAKURA, "Probing intermolecular structures of biomolecules in solid state using high resolution ^{1}H solid state NMR under ultra high speed MAS," EUROMAR2013, Hersonissos, Crete (Greece), July 2013.

M. TANIO, and K. NISHIMURA, "Intramolecular allosteric interaction in the phospholipase C-delta1 pleckstrin homology domain," 第 12 回日本蛋白質科学会年会, 愛知, 2013 年 6 月.

谷生道一, 西村勝之,「PLC-δ1 PH ドメインのタンパク質分子内情報伝達」, 第 40 回生体分子科学討論会, 大阪, 2013 年 6 月.

朝倉哲郎, 鈴木悠, 奥下慶子, 矢澤宏次, 大畑卓也, 西山裕介, 西村勝之, 梶弘典,「家蚕絹の固体 NMR による精密構造解析」, 平成 25 年度 繊維学会年次大会, 東京, 2013 年 6 月.

K. YAZAWA, Y. NISHIYAMA, K. NISHIMURA, H. KAJI and T. ASAKURA, "Understanding Complex Macromolecular and Supramolecular Systems using Innovative Magnetic Resonance Strategies," ACS polymer NM symposium, New Orleans (US), April 2013.

矢澤宏次, 大畑卓也, 朝倉哲郎, 西山祐介, 西村勝之, 梶弘典,「超高磁場・超高速 MAS 高分解能 ^{1}H 固体 NMR による家蚕絹の構造解析」, 第 62 回高分子学会年次大会, 京都, 2013 年 5 月.

須田理行, 加藤礼三, 山本浩史,「光応答性単分子膜を利用した光ゲート型超伝導トランジスタの開発」, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演, 京都, 2013 年 9 月.

須田理行, 加藤礼三, 山本浩史, 「κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Br を用いた光ゲート型超伝導トランジスタ」, 第 7 回分子科学討論会, 京都, 2013 年 9 月.

山本浩史,「光による界面分極変化と有機強相関トランジスタ」, 電子誘電体の新展開－光と分極がおりなす新物質相－研究会, 仙台, 2013 年 12 月.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦,「基板表面におけるバナジウムフタロシアニンの磁気特性に関する研究」, 第 16 回 XAFS 討論会, 東京, 2013 年 9 月.

中野裕仁, 中川剛志, 高木康多, 横山利彦,「X 線磁気円二色性による W(110)基板上 Co 超薄膜の磁性研究」, 第 16 回 XAFS 討論会, 東京, 2013 年 9 月.

中野裕仁, 中川剛志, 高木康多, 横山利彦,「W(110)基板上 Co 超薄膜の磁性研究」, 2013 年秋季大会日本物理学会, 徳島, 2013 年 9 月.

横山利彦, 江口敬太郎,「MnNi 合金の異方性熱膨張とインバー／逆インバー特性」, 第 16 回日本 XAFS 討論会, 東京, 2013 年 9 月.

江口敬太郎, 高木康多, 中川剛志, 横山利彦,「Ag 基板表面におけるバナジウムフタロシアニンの合成」, ナノ学会第 11 回大会, 東京, 2013 年 6 月.

Y. FURUTANI, "Water Molecules and Ions in Membrane Proteins Studied by FTIR Spectroscopy," The 5th International Conference as the 2012 OCARINA Annual International Meeting, Osaka (Japan), March 2013.

Y. FURUTANI, "Water Molecules and Ions in Membrane Proteins Studied by FTIR Spectroscopy," Annual Meeting on Photochemistry 2013, Matsuyama (Japan), September 2013.

古川 貢, 高橋 誠弥, 中村 敏和, 金 尚彬, 江 東林,「共有結合性有機骨格構造物質(COF)の光誘起時間分解 ESR による電子状態研究」, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 京都, 2013 年 9 月.

T. NAKAMURA, S. TAKAHASHI, S. JIN, K. FURUKAWA, D. JIANG, "Photoconduction Mechanism in Covalent Organic Framework (COF) Materials by using Time-Resolved ESR Spectroscopy," The 10th International Symposium on Crystalline Organic Metals Superconductors and Magnets (ISCOM2013), Montreal(Canada), July 2013.

T. NAKAMURA, K. FURUKAWA, S. TAKAHASHI, S. JIN, D. JIANG, "Time-Resolved ESR Spectroscopy Investigation of Photoconduction Mechanism in Covalent Organic Framework (COF) Materials," 55th Annual Rocky Mountain Conference on Magnetic Resonance, Denver(USA), July 2013.

K. KUWAJIMA, "Molecular mechanisms of cytotoxicity of HAMLET and other protein-oleic acid complexes," International Symposium on Protein Folding and Its Biological Significance, Aichi(JAPAN), March 2013.

石川春人, 中谷圭祐, 青野重利, 水谷泰久,「Heme Detoxification Protein によるヘム結晶化機構」, 第 40 回生体分子科学討論会, 大阪, 2013 年 6 月.

岡本泰典, 澤井仁美, 小倉麻梨子, 内田 毅, 石森浩一郎, 林 高史, 青野重利, 「Listeria monocytogenes のヘム取込みに関与する HupD のヘム結合挙動の解析」,第 7 回バイオ関連化学シンポジウム, 愛知, 2013 年 9 月.

H. ISHIKAWA, K. NAKATANI, S. AONO and Y. MIZUTANI, "Identification of active-site residues in heme detoxification protein," 16th International Biological Inorganic Chemistry, Grenoble (France), July 2013.

馬場正昭, 国重沙知, 山中孝弥, 村上 慧, 依光英樹, 大須賀篤弘,「新規合ナフトトフラン類の超音速ジェットレーザー分光とその分光学的性質」, 分子科学会, 京都, 2013 年 9 月.

川畑愛, 国重沙知, 鹿取俊治, 馬場正昭, 山中孝弥, 東林修平, 櫻井英博,「スマネンの超音速ジェット中高分解能スペクトル」, 分子科学会, 京都, 2013 年 9 月.

山中孝弥, 馬場正昭, 鹿取俊治, 川畑愛, 国重沙知, 高須洋介, 高橋義朗,「Yb2 分子のポテンシャルエネルギーと振動準位の研究」, 分子科学会, 京都, 2013 年 9 月.

鹿取俊治, 川畑愛, 馬場正昭, 国重沙知, 山中孝弥,「側辺縮合環式炭化水素の電子励起状態と励起状態ダイナミクス」, 分子科学会, 京都, 2013 年 9 月.

T. FUJI, Y. NOMURA, Y. T. WANG, A. YABUSHITA, and C. W. LUO, "Single-shot detection of mid-infrared spectra by chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases", CLEO/Europe-IQEC 2013, Munich(Germany), December 2013.

T. FUJI, Y. NOMURA, Y. T. WANG, A. YABUSHITA and C. W. LUO, "Carrier-envelope phase of ultrashort pulses generated by optical rectification process", CLEO/Europe-IQEC 2013, Munich(Germany), December 2013.

T. FUJI and Y. NOMURA, "Pulse characterization with absolute carrier-envelope phase value", CLEO-PR & OECC/PS 2013, Kyoto(Japan) , July 2013.

T. FUJI, Y. NOMURA, Y. T. WANG, A. YABUSHITA, C. W. LUO, T. KOHZAI and S. NAKANISHI, "Chirped pulse upconversion of mid-infrared pulses with four-wave difference frequency generation in gases", CLEO-PR & OECC/PS 2013, Kyoto(Japan) , July 2013.

T. FUJI and Y. NOMURA, "Complete waveform characterization of ultrashort pulses", CLEO-PR & OECC/PS 2013, Kyoto(Japan) , July 2013.

T. FUJI, Y. NOMURA, Y. T. WANG, A. YABUSHITA and C. W. LUO, "Mid-infrared chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases", CLEO: Science and Innovations 2013, San Jose(USA), June 2013.

T. FUJI and Y. NOMURA, "Generation of ultrabroadband infrared continuum by using four-wave mixing through filamentation," Short Pulse Strong Field Laser Physics International Symposium Honoring See Leang Chin, Quebec(Canada), May 2013.

T. FUJI and Y. NOMURA, "Coherent control of mid-infrared pulse generation by using four-wave mixing through filamentation," Fundamentals and Applications of Laser Filaments, Aichi(Japan), April 2013.

藤貴夫,「超短光パルスの測定方法」, JP-NetS2013, 福井, 2013 年 9 月.

T. FUJI, Y. NOMURA, and H. SHIRAI, "Real-time observation of single-cycle pulse waveforms by using FROG capable of CEP determination with pulse-front tilt," HILAS2014, Berlin(Germany), March 2013.

櫻井英博,「お椀型共役化合物「バッキーボウル」の化学～含窒素ヘテロボウルを中心に～」, ナノカーボンケミストリー研究会 2013, 仙台, 2013 年 3 月.

H. SAKURAI, "Asymmetric Synthesis of C_3 Symmetric Buckybowls," PERCH-CIC Congress VIII, Pattaya(Thailand), May 2013.

H. SAKURAI, "Matrix Effect on Catalytic Activity of *quasi*-Homogeneous Gold/Hydrophilic Polymer Composites," The 2nd International Congress on Advanced Materials, Zhenjiang (China), May 2013.

H. SAKURAI, "Synthesis of Sumanene and Related Buckybowls," 15th Asian Chemical Congress, Singapore, August 2013.

東林修平,「お椀型 π 共役分子バッキーボウルの合成」,第 30 回有機合成化学セミナー,岡山, 2013 年 9 月.

H. SAKURAI, "Substituted Sumanenes: From Fundamental to Applied Research", 9th IUPAC International Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 23rd International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers, Shanghai(China), October 2013.

H. SAKURAI, "Matrix Effect on Catalytic Activity of Colloidal Nanogold", 5th Asian Conference on Colloid and Interface Science, Darjeeling(India), November 2013.

H. SAKURAI, "Colloidal Nanogold as a Unique *quasi*-Homogeneous Catalyst," Pure and Applied Chemistry International Conference 2014(PACCON2014), Khon Kaen(Thailand),　January 2014.

櫻井英博,「バッキーボウル化学におけるキラリティ」, 第 5 回キラルサイエンス＆テクノロジーシンポジウム, 東京, 2014 年 2 月.

櫻井英博,「精密合成法を基盤とした非平面 π 共役化合物「バッキーボウル」に関する研究」, 日本化学会第 94 春季年会, 愛知, 2014 年 3 月.

櫻井英博,「バッキーボウルの特徴を生かした機能開発へ向けて」, 日本化学会第 94 春季年会, 愛知, 2014 年 3 月.

加藤晃一,「NMR を用いた生体分子のダイナミクスの解析」, 大阪市立大学分子ナノ情報解析センターユーザーズミーティング, 大阪, 2013 年 4 月.

加藤晃一,「生命分子のダイナミクスと自己組織化」, 国際高等研究所研究プロジェクト「分子基盤に基づく生体機能への揺らぎとダイナミックネットワークの解明」第 1 回研究会, 京都, 2013 年 5 月.

K. KATO, "Structural Glycobiology for Biophysical Decoding Sweet Messages," 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

M. YAGI-UTSUMI and K, KATO, "NMR approaches for characterizing interactions between GroEL and intrinsically disordered proteins", 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

T. SATOH, Y. UEKUSA, T. HIROMOTO, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "Structural insights into proteasome orchestration mechanism through a proteasome assembly factor Nas2", 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

T. YAMAGUCHI, Y. ZHANG and K. KATO, "Paramagnetic NMR approaches for revealing conformational dynamics of oligosaccharides", 8th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Jeju (Korea), May 2013.

矢木真穂,「NMR 法を用いたアミロイドβの構造研究」, 第 4 回「アルツハイマー病診断・治療薬創出に向けた革新的探索系構築に関する研究会」, 愛知, 2013 年 6 月.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO, Y. UEKUSA, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "NMR analyses of conformational dynamics and interactions of oligosaccharides by employing paramagnetic probes", The 22nd International Glycoconjugate Symposium (GLYCO 22), Dalian (China), June 2013.

P. BOONSRI, M. YAGI-UTSUMI, R. THAMMAPORN,T. YAMAGUCHI, K. YANAGI, K. CHOOWONGKOMOL, K. KATO and S. HANNONGBUA, "Structural Analyses of HIV-1 Reverse Transcriptase Induced by Non-Nucleoside Inhibitors, based on NMR Studies and Molecular Dynamic Simulations", EUROMAR 2013, Crete (Greece), July 2013.

T. SATOH, Y. UEKUSA, T. HIROMOTO, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "Mechanistic insights into the proteasome orchestration by a proteasome assembly chaperone Nas2", 7th International Conference on Structural Genomics (ICSG2013-SLS), Sapporo (Japan), July 2013.

K. INAGAKI, Y. UEKUSA, Y. KAMIYA, T. SATOH and K. KATO, "Structural basis underlying the redox-dependent domain rearrangement of the substrate-binding region of protein disulfide isomerase", 7th International Conference on Structural Genomics (ICSG2013-SLS), Sapporo (Japan), July 2013.

山口拓実, Zhang Ying, 王 進政, 喜多島敏彦, 千葉靖典, 戸谷希一郎, 神谷由紀子, 加藤晃一,「安定同位体標識と常磁性プローブ導入による高マンノース型糖鎖の NMR 動的構造解析」, 第 32 回日本糖質学会年会, 大阪, 2013 年 8 月.

加藤晃一,「立体構造からみた糖鎖の不均一性」, 第 32 回日本糖質学会年会, 大阪, 2013 年 8 月.

山口拓実, 加藤晃一,「NMR を用いた糖鎖のコンフォメーション揺らぎとクラスター特性の解析」, 国際高等研研究プロジェクト「分子基盤に基づく生体機能ネットワークとダイナミクスの解明」第 2 回研究会, 京都, 2013 年 8 月.

加藤晃一,「NMR を用いた生命分子のダイナミクス解析」, 第 2 回立命館大学 BKC 生体分子ネットワークセミナー, 滋賀, 2013 年 8 月.

K. KATO, "Dynamic organization of biomolecular systems for promotion of integrative functions," Summer School 2013 “Bioorganization”, Okazaki (Japan), August 2013.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO and K. KATO, "Paramagnetism-assisted NMR for atomic description of dynamic oligosaccharides," 糖鎖科学中部拠点 第 11 回若手の力フォーラム, 愛知, 2013 年 9 月.

T. ZHU, K. MURATA, T. TOSHIMORI, M. YAGI-UTSUMI, T. SATO and K. KATO, "Bacterial expression and EM analysis of UDP-glucose glycosyltransferase from a thermophilic fungus," 糖鎖科学中部拠点 第 11 回若手の力フォーラム, 愛知, 2013 年 9 月.

加藤晃一,「バイオ医薬品の構造をみる」, 日本バイオイメージング学会 第 22 回学術集会, 東京, 2013 年 9 月.

山口拓実, Zhang Ying, 王 進政, 戸谷希一郎, 榮 慶丈, 岡本祐幸, 神谷由紀子, 加藤 晃一,「ランタニドイオンを活用した常磁性 NMR 法による糖鎖の動的構造解析」, 第 7 回バイオ関連化学シンポジウム, 愛知, 2013 年 9 月.

加藤晃一,「糖鎖が担うタンパク質社会の秩序維持」, 市民公開講座・第 99 回分子科学フォーラム, 岡崎, 2013 年 9 月.

山口拓実,「常磁性効果を活用した糖鎖の立体構造解析－NMR と分子動力学計算によるコンフォメーション空間の探査－」, 日本分光学会 NMR 分光部会 平成 25 年度講習会, 愛知, 2013 年 10 月.

K. KATO, "NMR characterization of dynamic conformational ensembles of oligosaccharides and intermolecular interactions in glycolipid clusters," 5th Asia-Pacific NMR Symposium 2013, Brisbane (Australia), October 2013.

加藤晃一,「多次元 HPLC 法および NMR 法による糖鎖解析技術」, 抗体バイオ分析セミナー－抗体/バイオ医薬品における各種分析手法および解析手法－, 東京, 2013 年 10 月.

矢木-内海真穂,「ガングリオシドとの特異的な相互作用に伴うアミロイド関連タンパク質の構造移転の NMR 解析」, 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都, 2013 年 10 月.

M. YAGI-UTSUMI, "Assembly mechanism of hereditary amyloid-β variants upon their specific interactions with gangliosides," 1st Annual Meeting of the Centre for Misfolding Diseases, Cambridge (UK), November 2013.

加藤晃一,「糖鎖の機能解明を目指した NMR アプローチ」, 第 52 回 NMR 討論会, 金沢, 2013 年 11 月.

T. ZHU, K. MURATA, T. TOSHIMORI, T. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO, "EM tomography analysis of ER folding sensor enzyme UDP-glucose: glycoprotein glucosyltransferase," 平成 25 年度生理学研究所研究会「電子顕微鏡機能イメージングの医学・生物学への応用」, 愛知, 2013 年 11 月.

加藤晃一, 「タンパク質社会の秩序維持における糖鎖の役割」, お茶の水女子大学 糖鎖科学教育研究センター第 6 回公開シンポジウム, 東京, 2013 年 11 月.

加藤晃一,「糖鎖を見る：分子模型からムービーへ」, 生理学研究所研究会「構造の多様性に立脚した糖鎖機能の解明に向けて」, 愛知, 2013 年 11 月.

山口拓実, 加藤晃一,「生命分子アッセンブリーにおける分子間相互作用のダイナミクスの精密解析」, 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム, 愛知, 2013 年 11 月.

Y.-H. WANG, T. SATOH, T. HIROMOTO, Y. UEKUSA, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "Interaction mode of a proteasome assembly chaperone Nas2 with the proteasome Rpt5 subunit," 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム, 愛知, 2013 年 11 月.

Y. ZHANG, T. YAMAGUCHI, S. YAMAMOTO and K. KATO, "Conformation dynamics of ganglioside glycans as revealed by paramagnetism-assisted NMR spectroscopy," 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム, 愛知, 2013 年 11 月.

T. ZHU, K. MURATA, T. TOSHIMORI, T. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO, "Overall structure of ER folding sensor UDP-glucose: glycoprotein glucosyltransferase revealed by EM tomography," 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム, 愛知, 2013 年 11 月.

K. INAGAKI, Y. UEKUSA, Y. KAMIYA, S. ITOH, H. OKUMURA, T. SATOH and K. KATO, "Redox-dependent conformational changes of the substrate-binding region of protein disulfide isomerase," 山田研究会・統合バイオサイエンスシンポジウム, 愛知, 2013 年 11 月.

T. YAMAGUCHI, Y. ZHANG, Y. KAMIYA, Y. SAKAE, Y. OKAMOTO and K. KATO, "Paramagnetism-assisted NMR evaluation of molecular dynamics simulations for conformational characterization of oligosaccharides," Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), November 2013.

T. SATOH, H. YAGI, Y.-H. WANG, Y. UEKUSA, T. HIROMOTO, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA and K. KATO, "Structural basis for proteasome formation mediated by assembly chaperone Nas2," Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), November 2013.

Y.-H. WANG, T. SATOH, T. HIROMOTO, Y. UEKUSA, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "NMR characterization of the interaction of a proteasome assembly chaperone Nas2 with the proteasome Rpt5 subunit," SOKENDAI Asian Winter School "Innovations and Challenges in Molecular Science: From Basics to Cutting-edge Researches", Okazaki (Japan), December 2013.

R. THAMMAPORN, P. BOONSRI, K. CHOOWONGKOMON, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, S. HANNONGBUA and K. KATO, "NMR investigation of non-nucleoside inhibitors binding to HIV-1 reverse transcriptase," SOKENDAI Asian Winter School "Innovations and Challenges in Molecular Science: From Basics to Cutting-edge Researches", Okazaki (Japan), December 2013.

P. PADUNGROS, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Position Selective ^{13}C Labeling of Multi-Antennary Oligosaccharides for NMR Analysis," SOKENDAI Asian Winter School "Innovations and Challenges in Molecular Science: From Basics to Cutting-edge Researches", Okazaki (Japan), December 2013.

山口拓実,「核磁気共鳴法による糖鎖の 3 次元構造ダイナミクスの解明」, 第 2 回 NINS Colloquium, 静岡, 2013 年 12 月.

K. KATO and T. SATOH, "Exploration of micro-macro relationships in dynamic ordering of biomolecular systems and their underlying design principles," The 2nd International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, Kyoto (Japan), January 2014.

T. SATOH, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. MURATA, T. YAMAGUCHI, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, "A structural biology study of endoplasmic reticulum glycoprotein-folding machinery," The 2nd International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, Kyoto (Japan), January 2014.

Y.-H. WANG, T. SATOH, T. HIROMOTO, Y. UEKUSA, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, T. MIZUSHIMA, Y. SAEKI, K. TANAKA and K. KATO, "Molecular mechanisms of proteasome assembly: structural basis of Nas2 with proteasome Rpt5 subunit," The 2nd International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, Kyoto (Japan), January 2014.

T. YAMAGUCHI, Y. ZHANG, Y. KAMIYA, Y. SAKAE, Y. OKAMOTO and K. KATO, "Paramagnetism-assisted NMR approaches to the molecular basis of oligosaccharide functions, " The 2nd International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, Kyoto (Japan), January 2014.

K. KATO, "Dynamic Assembly of Proteins Involved in the Ubiquitin-/Proteasome-mediated Protein Degradation System," Joint IMS-KU Workshop on Molecular Sciences towards Green Sustainability, Bangkok (Thailand), January 2014.

K. KATO, "Mechanistic Insights into Dynamic Orchestration of Proteasomes," Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON)2014, Khon Kaen (Thailand), January 2014.

K. KATO, "Conformational Dynamics of Oligosaccharides Characterized by Paramagnetism-assisted NMR Spectroscopy in Conjunction with Molecular Dynamics Simulation," The 10th International Symposium on Biochemical roles of Eukaryotic Cell Surface Macromolecules, Kolkata (India), January 2014.

K. KATO, "NMR approaches for elucidating the functional roles of carbohydrate chains," 20^{th} Symposium of National Magnetic Resonance Society, India; NMRS-2014, Tezpur(India), January 2014.

３．国際会議のプロシーディングス　(2件)

M. SUDA, R. KATO, H. M. YAMAMOTO, "Photo-induced enhancement of superconductivity in k-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$ laminated on a photochromic self-assembled monolayer," The 10th International Symposium on Crystalline Organic Metals Superconductors and Ferromagnets (ISCOM2013), Montréal,July, 2013.

M. SUDA, R. KATO, H. M. YAMAMOTO, "Fabrication of Photo-gated Superconducting Transistor utilizing a single crystal of κ-$(BEDT\text{-}TTF)_2$ Cu $[N(CN)_2]Br$," International School and Symposium on Molecular Materials (ISSMM2013), Tokyo(Japan), November 2013.

編集委員

編集担当	大島　康裕	（委員長）
	高山　敬史	（編集担当）
	岡野　芳則	（研究紹介・施設利用報告書担当）
	牧田　誠二	（所有設備紹介・交流・設備利用状況担当）
	藤原　基靖	（センターの利用方法担当）
	中川　信代	（事務担当）

機器センターたより　No.6

発行日　平成26年6月30日（年1回発行）

発　行　大学共同利用機関法人　自然科学研究機構
分子科学研究所　機器センター
〒444-8585
愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38

編　集　大島　康裕（センター長）
高山　敬史（編集長）

印　刷　株式会社エニウェイ

本誌記載記事の無断転載を禁じます

Instrument Center

Nishigonaka 38, Myodaiji, Okazaki 444-8585 Aichi, Japan
TEL : +81-564-55-7470
FAX : +81-564-55-7448
http://ic.ims.ac.jp/
mail to: ic-office@ims.ac.jp